

**KLASSISCHE DYNAMIK
VON DISSIPATIV GEKOPPELTEN
OSZILLATORSYSTEMEN**
Dämpfungseinbrüche und Lasereigenschaften

Martin Maurer

*Duss
München
1984*



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41548306_0028

KLASSISCHE DYNAMIK
VON DISSIPATIV GEKOPPELTEN
OSZILLATORSYSTEMEN

(Dämpfungseinbrüche und Lasereigenschaften)

Dissertation der Fakultät für Physik
der
Ludwig-Maximilians-Universität
München

vorgelegt
von
Martin Maurer
aus Berlin

München, den 9. Januar 1984

1. Berichterstatter: Prof. Dr. E. Weidemann

2. Berichterstatter: Prof. Dr. G. Süßmann

Tag der mündlichen Prüfung: 30. 5. 1984

DISSERTATIONS - UND FOTODRUCK FRANK GmbH
8000 München 2, Gabelsbergerstraße 15, Tel. 2809090

Zusammenfassung

Für ein System von klassischen Oszillatoren, die an ein Wärmebad gekoppelt sind, wird eine konservative Hamiltonfunktion formuliert, die die Energie des Gesamtsystems repräsentiert. Daraus lassen sich in kanonischer Weise die Bewegungsgleichungen der Oszillatoren ableiten, wobei durch Linearisierung in den Oszillatorkoordinaten die Wechselwirkung mit dem Bad parametrisiert werden kann. Damit erhält man in den Bewegungsgleichungen geschwindigkeitsabhängige Terme, die die Dämpfung und eine dissipative Kopplung der Oszillatoren darstellen. Aus diesen Bewegungsgleichungen läßt sich die frequenzabhängige Suszeptibilität (Responsefunktion) des Systems und deren Aufspaltung in die Suszeptibilitäten der geänderten Moden berechnen. Da die Geschwindigkeitskopplung, wie die dissipative Kopplung im folgenden auch bezeichnet wird, und die Dämpfungskonstanten voneinander abhängig sind, lassen sich daraus Bedingungen ableiten, bei denen das System entweder Dämpfungseinbrüche ("Transmissionsfenster" oder "Evans-Holes") im absorptiven Anteil der Suszeptibilität zeigt, oder kohärente Zustände ausbildet, wenn man inkohärente Wellenpakete einstrahlt, was als Lasereigenschaft des Systems interpretiert werden kann. Die Berechnung des Rauschspektrums des Oszillatorsystems unter Laserbedingungen ergibt für die Laserfrequenz einen Dämpfungseinbruch.

Inhalt

Zusammenfassung

I.) Einleitung	3
II.) Hamiltonfunktion für zwei gekoppelte gedämpfte Oszillatoren	9
II.1 Beschreibung des Modells ohne Lagenkopplung	9
II.2 Bewegungsgleichungen für die Oszillatorvariablen $x_a(t)$ und $x_b(t)$, Liouville-Operator.....	12
II.3 Bewegungsgleichungen für die Badvariablen $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$	14
II.4 Näherung und Linearisierung der Bewegungsgleichungen in $x_a(t)$ und $x_b(t)$	15
II.5 Modell mit Lagenkopplung	21
II.6 Bedeutung der Kopplungsterme $\alpha_{\beta\gamma}\alpha_{\gamma\beta}C_{\beta\gamma}^{\ddot{u}}$, Zusammenhang mit der Statistik	23
II.7 Dichtefunktion und Responsefunktionen für ein System paarweise gekoppelter gedämpfter Oszillatoren.....	29
II.8 Zusammenfassung des Kapitels	37
III.) Responsefunktion, Eigenwerte und Absorptionsprofil für das gekoppelte System.....	38
III.1 Berechnung der frequenzabhängigen linearen Response und des Absorptionsprofils aus den Bewegungsgleichungen	38
III.2 Änderung der Eigenfrequenzen und der Dämpfungskonstanten.....	44
III.3 Absorptionsprofile	47
III.4 Zerlegung der Responsefunktionen und die Responsefunktionen für zwei angeregte Oszillatoren	53
III.5 Berechnung der zeitabhängigen Responsefunktionen.....	57
III.6 Zusammenfassung des Kapitels	63
IV.) Lösungen der Bewegungsgleichungen und Anwendungen des Modells	64
IV.1 Berechnung der Schwingungen für eine δ -funktionsartige Kraft.....	64
IV.2 Berechnung der Schwingungen für eine periodische Kraft	64
IV.3 Dämpfungseinbrüche	76
IV.4 Langlebige Zustände, Laser-Effekt und Schawlow-Townes-Bedingung ..	86
IV.5 Zusammenfassung des Kapitels	101

V.) Zusammenfassende Diskussion der Ergebnisse.....	102
Anhang	105
A1 Verifizierung der Lösung (2.22) von $g_{yi}(t)$	105
A2 Umformung der Integrale in (2.36)	106
A3 Dichtefunktion für gekoppelte gedämpfte Zustände und Mittelwertbildung	107
A4 Nullstellen des char. Polynoms $P_{\text{st}}(-i\omega)$	110
A5 Energieintegral, Energiebilanz für Anregung mit einer periodischen Kraft und Nyquist-Theorem	116
A6 Exakte Formulierung der Responsefunktionen	122
Literatur.....	124

I.) Einleitung

Das irreversible und dissipative Verhalten der großen Mehrheit der physikalischen Erscheinungen steht im Gegensatz zur reversiblen Formulierung der physikalischen Grundmodelle, ein Problem, das die Physik bis heute beschäftigt, vor allem in Hinblick auf eine quantenmechanische Formulierung dissipativer Systeme. Dabei wurde vor allem das Problem des gedämpften harmonischen Oszillators behandelt, ein Modell, das man auf viele Bereiche der Physik wenigstens näherungsweise anwenden kann. Einen umfangreichen Überblick über die bestehenden theoretischen Ansätze gibt Dekker [1]. Die phänomenologische Beschreibung von dissipativen Kräften in der klassischen Mechanik läßt sich in der Newton'schen Formulierung ohne große Schwierigkeiten einführen [2,3]. Probleme entstehen dann, wenn man mit Hilfe des Lagrange- bzw. Hamiltonformalismus versucht, die dissipativen Vorgänge zu beschreiben. Ein Überblick über dieses Unternehmen im Bereich der klassischen Physik und in der Quantenmechanik ist in [1] sowie bei Hasse [4] und Messer [5] zu finden, wobei die beiden letzteren ihren Schwerpunkt auf die Formulierung des Hamiltonoperators für quantenmechanische gedämpfte Systeme gelegt haben. Im Folgenden sollen einige Entwicklungen skizziert werden, wobei für die vollständige Darstellung immer auf die o.a. Zitate, vor allem auf [1], zurückverwiesen werden muß.

Ein Ansatz, der zu nichtlinearen Schrödingergleichungen führt, stammt von Süßmann, Albrecht und Hasse [6,7]. Für diesen Hamiltonoperator ergeben sich der klassische Zusammenhang zwischen Ort und Impuls und die klassischen Bewegungsgleichungen für die Mittelwerte. Dieses Modell führt jedoch dazu, daß die stationären Lösungen nicht asymptotisch stabil sind. In einer weiteren Arbeit wurde von Stocker und Albrecht [8] gezeigt, daß sich dieses Modell in den Rahmen einer fluiddynamischen Interpretation der klassischen Hamilton-Jacobi-Theorie und der Schrödinger'schen Wellenmechanik einordnen läßt.

Zu einer ähnlichen Form des Hamiltonoperators gelangt Hasse in einer Arbeit [9], in der gezeigt wird, wie sich durch eine nichtlineare Schrödingergleichung die quantenmechanische Master-Gleichung approximieren läßt, womit man den dissipativen Grundzustand eines gedämpften harmonischen Oszillators beschreiben kann. Wie in [1], §10 gezeigt wird, läßt sich die Methode auf die klassische Theorie übertragen, wobei man nun eine komplexe Hamiltonfunktion erhält, die die Bewegungsgleichung eines klassischen

gedämpften harmonischen Oszillators

$$\ddot{x}(t) + 2\gamma \dot{x}(t) + \omega^2 x(t) = 0 \quad (1.1)$$

über die Hamilton'schen Gleichungen ergibt.

Ein zweiter Weg zur Beschreibung dissipativer Systeme über Hamiltonfunktionen stammt von Bateman [10], dessen rein klassische Betrachtungsweise von Bopp [11] und davon unabhängig von Feshbach und Tikochinsky [12] in die Quantenmechanik übertragen wurde. Dabei werden duale Koordinaten eingeführt, was bedeutet, daß dem System, das durch die Bewegungsgleichung (1.1) beschrieben wird, ein anderes System hinzugefügt wird, dessen Bewegungsgleichung

$$\ddot{y}(t) - 2\gamma \dot{y}(t) + \omega^2 y(t) = 0 \quad (1.2)$$

ist. Somit wird das Gesamtsystem konservativ mit einer Hamiltonfunktion

$$H = m \dot{x} \dot{y} + m \omega^2 x y \quad (1.3)$$

Dies läßt sich auch in einem komplexen symplektischen Modell formulieren, in dem der gedämpfte harmonische Oszillator durch komplexe dynamische Variablen beschrieben wird (siehe [1], §6). Man erhält eine Hamiltonfunktion, mit der sich im komplexen dualen Phasenraum eine klassische Liouville-Gleichung konstruieren läßt. Durch Phasenraumintegration über das adjungierte System läßt sich das physikalische System abseparieren (siehe [1], §7). Zu denselben Ergebnissen gelangt Burzlaff [14], wobei er mit Hinzunahme eines adjungierten Systems eine Kontinuitätsgleichung entwickelt und damit eine Quantisierung stochastischer Systeme vorschlägt. Obwohl diese Methode der Hinzunahme adjungierter Systeme auch klassisch die korrekten Bewegungsgleichungen hervorbringt, ist die daraus resultierende Hamiltonfunktion lediglich eine mathematische Funktion zur Erzeugung der Bewegungsgleichungen, die aber nicht die Energie des physikalischen Systems beschreibt (Gosh, Hasse [15]), was auch daran zu erkennen ist, daß man i.a. den Grenzübergang $\gamma \rightarrow 0$ in (1.3) nicht durchführen kann.

In einer weiteren Formulierung des Modells, die ebenfalls von Bateman [10] abgeleitet wurde, und die allgemein Caldirola [16] und Kanai [17] zugesprochen wird, wird eine explizit zeitabhängige Hamiltonfunktion

$$H = \frac{p^2}{2m} e^{-2\gamma t} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 e^{2\gamma t} \quad (1.4)$$

erzeugt, die wiederum über die kanonischen Gleichungen zur Bewegungsgleichung (1.1) führt. Eine kanonische Quantisierung dieses Systems wirft jedoch Probleme auf, da dabei die Unschärfebeziehung verletzt wird [1,5]. Senitzky [18] und Messer [5] machten dafür die Vernachlässigung der stochastischen Kräfte in der Bewegungsgleichung verantwortlich und konnten damit diesen Fehler korrigieren. In neuerer Zeit wurden von verschiedenen Autoren Versuche unternommen, aus einer allgemeineren Form der Bewegungsgleichung

$$\ddot{x}(t) = f(t, \dot{x}(t), x(t)) \quad (1.5)$$

im Rahmen der Lagrange- bzw. Hamiltontheorie Lagrange- und Hamiltonfunktionen zu erzeugen, die auf kanonische Weise quantisiert werden können [20,21,22,23]. Einer der Autoren [23] betonte allerdings, daß diese Hamiltonfunktionen bzw. Hamiltonoperatoren wahrscheinlich unphysikalisch sind, da ihre Erwartungswerte nicht die Energie des Systems ausdrücken müssen, und der Grenzübergang zu verschwindender Dämpfung nicht den Standard-Hamiltonoperator ergibt. Dazu zeigte Lemos [24], daß bei dissipativen Systemen keine eindeutige Lagrangefunktion und damit auch keine eindeutige Hamiltonfunktion bestimmt werden kann, so daß eine Quantisierung des Systems nicht in eindeutiger Weise möglich ist. Speziell für den Kanai-Operator (1.4) wiesen Greenberger [25] und unabhängig davon Ray [26] darauf hin, daß dieser keine physikalische Bedeutung besitzt, wenn man ihn als Hamiltonoperator eines gedämpften Systems betrachtet. Vielmehr beschreibt (1.4) ein nicht gedämpftes System, dessen Masse aber zeitabhängig ist. Greenberger [25] erweiterte die kanonische Formulierung auf ein System mit veränderbarer Masse, indem er zu dem kanonischen Paar (x,p) noch ein weiteres Paar (τ,m) hinzufügte und eine Hamiltonfunktion

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - 2\gamma m \tau$$

mit (1.6)

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{m} = -\frac{\partial H}{\partial \tau} = 2\gamma m$$

formulierte, mit der er wieder die Bewegungsgleichung (1.1) erhielt. Dabei hat τ keinerlei physikalische Bedeutung (Anm.: in der stat. Thermodynamik

könnte τ als "chemisches Potential" interpretiert werden).

Man sieht, daß es i.a. schwierig ist, aus einer phänomenologischen Beschreibung von dissipativen Vorgängen eine Hamiltonfunktion zu finden, von der sich in kanonischer Weise die Bewegungsgleichungen ableiten lassen. Vor allem ist dann die Interpretation der Hamiltonfunktion als Energiefunktion des Systems nicht mehr zulässig, was bei einer Quantisierung des Systems dazu führt, daß die Eigenwerte des damit entstehenden Hamiltonoperators nicht den Eigenwerten des Energieoperators entsprechen und i.a. einer physikalischen Interpretation schwer zugänglich sind. Besonders nachteilig erweist sich bei den phänomenologischen Theorien die Tatsache, daß es nicht möglich ist, eine Hamiltonfunktion zu formulieren, aus der die Bewegungsgleichungen zweier gekoppelter Oszillatoren mit verschiedenen Dämpfungskonstanten

$$\ddot{x}_a(t) + 2\gamma_a \dot{x}_a(t) + \omega_a^2 x_a^2(t) = -k_L^2(x_a(t) - x_b(t)) - 2k_V(\dot{x}_a(t) - \dot{x}_b(t)) \quad (1.7)$$

$$\ddot{x}_b(t) + 2\gamma_b \dot{x}_b(t) + \omega_b^2 x_b^2(t) = -k_L^2(x_b(t) - x_a(t)) - 2k_V(\dot{x}_b(t) - \dot{x}_a(t))$$

in kanonischer Weise abgeleitet werden können.

Diese Hamiltonfunktion zu finden erwies sich aber als notwendig für die Behandlung des Problems, das sich in der vorliegenden Arbeit stellte. Ausgangspunkt der Überlegungen war ein Modell von Weidemann und Hayd [27], in dem der Einfluß der Fermiresonanz auf Absorptionsprofile im Infrarotbereich berechnet wurde. Dabei ergab sich, daß unter bestimmten Umständen im Absorptionsprofil Transmissionsfenster, die sogenannten "Evans-Holes" [28], auftreten können, d.h. Frequenzbereiche, bei denen (fast) keine Absorption stattfindet. Es stellte sich zunächst die Frage, ob diese Evans-Holes rein quantenmechanische Effekte sind, oder ob es möglich ist, sie innerhalb eines klassischen Modells zu finden, wobei noch zu prüfen war, welchen Einfluß die Geschwindigkeitskopplung, d.h. eine zur Differenz der Geschwindigkeiten beider Oszillatoren proportionale Kopplung, auf das Absorptionsverhalten des Systems hat. Zum besseren Verständnis der Dissipation ist es nützlich, sich daran zu erinnern, daß dieser Begriff zum Ausdruck bringt, daß man sich in einem sehr großen System auf die Beobachtung des Verhaltens makroskopischer Größen eines Untersystems beschränkt, das eine mikroskopisch reversible Wechselwirkung mit dem Rest

des Gesamtsystems hat, dem sogenannten Wärmebad [29]. Damit lassen sich die Methoden der statistischen Mechanik anwenden, indem man das Problem auf die Bewegung zweier harmonischer Oszillatoren, also zweier Brown'scher Teilchen, in einem Wärmebad zurückführt. Für ein Teilchen wurde dies schon von Ford et al. [30] und quantenmechanisch von Senitzky [18,19] und Diestler [31] behandelt. Zwei gekoppelte Teilchen wurden in neuerer Zeit von Berkowitz und McCammon [32] und Mohanty et al. [33] in der klassischen Theorie behandelt, wobei die ersteren nur die phänomenologischen Bewegungsgleichungen mit Lagenkopplung behandelten und keine Hamiltonfunktion formulierten, die letzteren zwei über ein harmonisches Potential gekoppelte Teilchen betrachteten, ein Problem, das sich wieder auf ein Ein-Oszillator-System im Wärmebad zurückführen läßt. Ähnliche Ansätze wie in der vorliegenden Arbeit wurden zur Modellierung von Fermi-Resonanz-Spektren von McHale und Wang [34] und Fujita und Kimura [35] gemacht, die eine rein quantenmechanische Rechnung durchführten und dabei Terme vernachlässigten, die der Geschwindigkeitskopplung in (1.7) entsprechen. In dieser Arbeit wurde nun eine Hamiltonfunktion formuliert, die ein klassisches Zwei-Oszillator-System in einem Wärmebad beschreibt. Unter der Annahme schwacher Wechselwirkung zwischen den Oszillatoren und den Badteilchen läßt sich in den kanonischen Bewegungsgleichungen eine Linearisierung in den Oszillatorkoordinaten durchführen, die aber berücksichtigt, daß zwischen den Badteilchen stark nichtlineare Wechselwirkungen stattfinden können. Zur Vereinfachung wurde angenommen, daß sich Wechselwirkungen zwischen den Badteilchen durch Gauß-Markoff-Prozesse [36] beschreiben lassen, eine Annahme, die nicht notwendig ist zur Durchführung der Rechnung. Man erhält damit nun Bewegungsgleichungen der Form (1.7) von einer Hamiltonfunktion, die nicht explizit zeitabhängig ist, die Gesamtenergie des Systems beschreibt und für verschwindende Dämpfung stetig in die Standard-Hamiltonfunktion für zwei Oszillatoren übergeht. Es zeigt sich dabei, daß man i.a. die Existenz eines Geschwindigkeitskopplungsterms annehmen muß, wobei Dämpfungsparameter und die Geschwindigkeitskopplungskonstante voneinander abhängig sind.

Diese Hamiltonfunktion für zwei Oszillatoren im Wärmebad läßt sich genauso für eine statistische Gesamtheit von paarweise wechselwirkenden Oszillatoren im Bad formulieren. Damit kann man eine Dichtefunktion zur Berechnung von Mittelwerten aufstellen und daraus Responsefunktionen ableiten, die den Einfluß einer äußeren Kraft auf das System beschreiben. Dies bildet den Inhalt des zweiten Kapitels.

In Kapitel III werden die Bewegungsgleichungen für die statistischen Mittelwerte der Oszillatoren im Rahmen der vorgegebenen Näherungen streng analytisch gelöst, wobei man hier die Methoden der "Linear-Response"-Theorie [38,39,40] benutzen kann. Die damit erhaltenen Response-Funktionen ermöglichen die Berechnung der durch die Kopplung geänderten Eigenfrequenzen und Dämpfungskonstanten und eine Zerlegung des Absorptionsprofils in die Anteile der geänderten Schwingungsmoden. Umfangreiche analytische Berechnungen wurden durch die Benutzung der Programmiersprache REDUCE [41] erleichtert.

In Kap. IV werden dann die explizit zeitabhängigen Lösungen der Bewegungsgleichungen errechnet. Mit ihnen und den dazugehörigen Absorptionsprofilen läßt sich zeigen, daß man bei Anregung der Gleichtaktschwingung auch im klassischen System Evans-Holes erhält, deren Verhalten sich aber meistens von dem der quantenmechanischen Evans-Holes unterscheidet. Andererseits lassen sich bei Anregung der Gegentaktschwingung durch den Einfluß der Geschwindigkeitskopplung und durch "Konditionierung" des Systems kooperative Effekte [42] erzeugen, die zu Zuständen langer Lebensdauer und hoher kohärenter Ausgangsleistung führen. Man kann somit einen Aspekt der Lasereigenschaft eines Mediums in einer Form beschreiben, wie sie in der Literatur noch nicht diskutiert wurde. Unter der Einbeziehung der stochastischen Kräfte auf das Oszillatorsystem lassen sich auch Aussagen über das Rauschverhalten des Systems machen, wenn die Laserbedingung erfüllt ist.

II.) Hamiltonfunktion für zwei gekoppelte gedämpfte Oszillatoren

Im folgenden Kapitel soll in Anlehnung an die Methode von Senitzky [18,19] eine Hamiltonfunktion aufgestellt werden, die das Verhalten zweier Oszillatoren in einem dissipativen Medium beschreibt (Bild 1). Man kann sich darunter z.B. zwei Oszillatoren vorstellen, die sich in einem Gas oder in einer Flüssigkeit bewegen, deren Moleküle die Oszillatoren stoßen. Dabei wird zwischen dem dissipativen Medium, das künftig als Wärmebad bezeichnet werden soll, und den Oszillatoren Energie ausgetauscht. Makroskopisch kann dies in der Weise beschrieben werden, daß man in die



Bild 1: Oszillatoren im Wärmebad

Bewegungsgleichungen der Oszillatoren geschwindigkeitsabhängige Terme einführt, die eine Dämpfung des Systems bewirken. Das Ziel des Kapitels ist es nun, aus der Hamiltonfunktion des Systems Oszillator-Bad Bewegungsgleichungen für die Oszillatoren zu finden, mit denen

man bei Annahme bestimmter Näherungen zu einer makroskopischen Beschreibung mit linearer Dämpfung gelangt. Gewünscht ist dabei eine vollständige Beschreibung des Oszillatorsystems, in der sehr wenig Information über das Wärmebad verlangt wird, da dieses sehr viele (im Grenzfall unendlich viele) Freiheitsgrade besitzt, die mit ihren Wechselwirkungen nur statistisch beschrieben werden können. Mit dieser Hamiltonfunktion können aber auch statistische Gesamtheiten von Oszillatoren in einem Wärmebad beschrieben werden, wobei die Dichtefunktion $\varrho_s(t)$ die Dynamik des Systems bestimmt.

II.1 Beschreibung des Modells ohne Lagenkopplung

Um die Berechnung zu vereinfachen, soll zuerst die Hamiltonfunktion des Systems zweier Oszillatoren "a" und "b" aufgestellt werden, wie es in Bild 1 beschrieben ist. Die Oszillatoren "a" und "b" werden durch die kanonischen Paare (x_a, p_a) und (x_b, p_b) repräsentiert und sollen die gleiche Masse m haben, eine Einschränkung, die wieder nur zur Vereinfachung dient und weiter nicht wesentlich ist. Die Bewegungsgleichungen und die dazugehörige Hamiltonfunktion im ungestörten System lauten:

$$\ddot{x}_a^0(t) + \omega_a^2 x_a^0(t) = 0 \quad , \quad \ddot{x}_b^0(t) + \omega_b^2 x_b^0(t) = 0 \quad (2.1)$$

$$H_{osc}^0 = \frac{p_a^0{}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_a^2 x_a^0{}^2 + \frac{p_b^0{}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_b^2 x_b^0{}^2 \quad (2.2)$$

Das ungestörte Wärmebad wird durch die Hamiltonfunktion $H_B^0(\vec{x}^0, \vec{p}^0)$ mit $\vec{x}^0 = (x_a^0, \dots, x_i^0, \dots)$, $\vec{p}^0 = (p_a^0, \dots, p_i^0, \dots)$ beschrieben. Sowohl H_{osc}^0 als auch H_B^0 sind Konstanten in der Zeit. Koppelt man nun das Oszillatorsystem an das Bad, ändern sich die $x_a^0, p_a^0, \dots, x_i^0, p_i^0$, was durch das Weglassen des Index 0 beschrieben werden soll. Die Gesamthamiltonfunktion läßt sich folgendermaßen darstellen:

$$H = H_{osc} + H_B(\vec{x}, \vec{p}) + V_{aB}(x_a, p_a, \vec{x}, \vec{p}) + V_{bB}(x_b, p_b, \vec{x}, \vec{p}) \quad (2.3)$$

$$\text{mit:} \quad H_{osc} = \frac{p_a^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_a^2 x_a^2 + \frac{p_b^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_b^2 x_b^2 \quad (2.3a)$$

$$H_B(\vec{x}, \vec{p}) = \text{Ham.-Fkt. des gestörten Bades} \quad (2.3b)$$

und den Wechselwirkungspotentialen $V_{aB}(x_a, p_a, \vec{x}, \vec{p})$ und $V_{bB}(x_b, p_b, \vec{x}, \vec{p})$.

H_{osc} und $H_B(\vec{x}, \vec{p})$ werden nun zeitabhängig, da wegen der gegenseitigen Wechselwirkung ein Energieaustausch zwischen beiden Untersystemen stattfindet. Im Gesamtsystem bleibt aber die Energie erhalten, es gilt also:

$$\frac{dH}{dt} = \{ H, H \} = 0 \quad (2.4)$$

wobei $\{.,.\}$ die Poissonklammer bedeutet:

$$\{ A, B \} = \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial x_j} \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial B}{\partial x_j} \right) \quad (2.5)$$

Die Kopplung der Systeme soll so wirken, daß sie sich zum Zeitpunkt $t=t_0$ adiabatisch einschaltet, das heißt, für $t < t_0$ ist:

$$V_{aB} = V_{bB} = 0 \quad , \quad H = H_{osc}^0 + H_B^0$$

Beide Systeme sind dann wieder entkoppelt, das ungestörte Bad läßt sich durch eine kanonische Verteilung mit der Dichtefunktion:

$$S_B^0 = \frac{1}{Z_B^0} e^{-\beta H_B^0(\vec{x}^0, \vec{p}^0)} \quad Z_B^0 = \int d\vec{x} d\vec{p} e^{-H_B^0} \quad (2.6)$$

$$\beta = 1/kT$$

beschreiben. Für die Wechselwirkung läßt sich nun folgender Ansatz machen: Betrachtet man Bild 1, kann man sich die zwei Oszillatoren eingebettet denken in einen sehr großen Behälter, der ein Gas oder eine Flüssigkeit enthält, die das Wärmebad repräsentieren. Die Gasmoleküle (oder Flüssigkeitscluster) vollführen entsprechend ihrer thermischen Anregung unregelmäßige Stöße mit sich und den zwei Oszillatoren, wobei sie über die Impulse kinetische Energie austauschen. Ist nun die Masse der Oszillatoren sehr viel größer als die der Badteilchen, wird der Impulsübertrag auf die Oszillatoren durch einen Stoß mit einem Badteilchen gering sein, erst die Summation über alle Stöße mag einen merklichen Beitrag geben.

Es ist also sinnvoll, die WW-Potentiale V_{aB} und V_{bB} um den Gleichgewichtswert der Oszillatorimpulse und -orte zu entwickeln und sich auf die lineare Näherung zu beschränken. Da x_a und x_b schon die Abweichungen der Oszillatoren von ihren Gleichgewichtslagen sind, erhält man für V_{aB} und V_{bB} ($t > t_0$):

$$V_{aB}(x_a, p_a, \vec{x}, \vec{p}) = V_{aB}(\bar{x}_a, \bar{p}_a, \vec{x}, \vec{p}) + \alpha_1 p_a(t) \sum_i g_{1i}(\bar{x}_a, \bar{p}_a, x_i(t), p_i(t)) \\ + m \alpha_3 x_a(t) \sum_i g_{3i}(\bar{x}_a, \bar{p}_a, x_i(t), p_i(t)) \quad (2.7a)$$

$$V_{bB}(x_b, p_b, \vec{x}, \vec{p}) = V_{bB}(\bar{x}_b, \bar{p}_b, \vec{x}, \vec{p}) + \alpha_2 p_b(t) \sum_i g_{2i}(\bar{x}_b, \bar{p}_b, x_i(t), p_i(t)) \\ + m \alpha_4 x_b(t) \sum_i g_{4i}(\bar{x}_b, \bar{p}_b, x_i(t), p_i(t)) \quad (2.7b)$$

$\bar{x}_a$ bzw. $\bar{x}_b$ repräsentieren die Gleichgewichtswerte der beiden Oszillatoren, der erste Term in (2.7a) bzw. (2.7b) ist also konstant bez. x_a , p_a bzw. x_b , p_b und kann in die Bad-Hamilton-Funktion einbezogen werden, so daß er für die späteren Betrachtungen Null gesetzt werden kann. Die einzelnen Summanden der weiteren Terme in (2.7) beschreiben die zu den Impulsen und Orten der Oszillatoren proportionalen Wechselwirkungen mit dem i-ten Badteilchen, wenn man nur Zwei-Körperkräfte berücksichtigt. Die Kopplungskonstanten α_γ ($\gamma=1, \dots, 4$) sind bei jeder Kopplungsart gleich, da die Badteilchen identische Eigenschaften haben sollen. Die g_γ sind die Gewichtsfunktionen, die bestimmen, mit welcher Stärke das i-te Badteilchen zur Kopplung beiträgt. Ihre Form hängt vom jeweiligen Modell ab und soll

nicht näher spezifiziert werden. Es genügt zu wissen, daß sie abhängig sind vom Abstand des i-ten Badteilchens zur Gleichgewichtslage der einzelnen Oszillatoren, so daß i.a. nur Badteilchen in unmittelbarer Umgebung des jeweiligen Oszillators mit diesem wechselwirken. Außerdem hängen sie nur über die Badkoordinaten von der Zeit ab. In abgekürzter Schreibweise kann man also den WW-Anteil der Hamiltonfunktion (2.3) folgendermaßen formulieren:

$$V_{aB}(x_a, p_a, \vec{x}, \vec{p}) = \alpha_1 p_a(t) \sum_i g_{1i}(t) + m \alpha_2 x_a(t) \sum_i g_{3i}(t) \quad (2.8a)$$

$$V_{bB}(x_b, p_b, \vec{x}, \vec{p}) = \alpha_2 p_b(t) \sum_i g_{2i}(t) + m \alpha_4 x_b(t) \sum_i g_{4i}(t) \quad (2.8b)$$

Mit diesen Wechselwirkungspotentialen kann man nun die Bewegungsgleichungen für $x_a(t)$ bzw. $x_b(t)$ berechnen.

II.2 Bewegungsgleichungen für die Oszillatorvariablen $x_a(t)$ und $x_b(t)$, Liouville-Operator

Für die Bewegungsgleichungen der Oszillatoren "a" und "b" erhält man die kanonischen Gleichungen:

$$\dot{x}_a = \{x_a, H\} = \frac{p_a}{m} + \alpha_1 \sum_i g_{1i}(t), \quad -\dot{p}_a = -\{p_a, H\} = m(\omega_a^2 x_a + \alpha_2 \sum_i g_{3i}(t)) \quad (2.9a, b)$$

$$\dot{x}_b = \{x_b, H\} = \frac{p_b}{m} + \alpha_2 \sum_i g_{2i}(t), \quad -\dot{p}_b = -\{p_b, H\} = m(\omega_b^2 x_b + \alpha_4 \sum_i g_{4i}(t)) \quad (2.9c, d)$$

was zu den Gleichungen

$$\ddot{x}_a + \omega_a^2 x_a = - \sum_i (\alpha_3 g_{3i}(t) - \alpha_1 \dot{g}_{1i}(t)) \quad (2.10a)$$

$$\ddot{x}_b + \omega_b^2 x_b = - \sum_i (\alpha_4 g_{4i}(t) - \alpha_2 \dot{g}_{2i}(t)) \quad (2.10b)$$

führt. Mit $x_{a/b0} = x_{a/b}(t_0)$ und $\dot{x}_{a/b0} = \dot{x}_{a/b}(t_0)$ erhält man die Lösungen der homogenen Gleichungen:

$$x_{ah} = x_{a0} \cos \omega_a(t-t_0) + \frac{\dot{x}_{a0}}{\omega_a} \sin \omega_a(t-t_0) \quad (2.11a)$$

$$X_{bh} = X_{b0} \cos \omega_b (t-t_0) + \frac{V_{b0}}{\omega_b} \sin \omega_b (t-t_0) \quad (2.11b)$$

und durch Variation der Konstanten die partikulären Lösungen:

$$X_{ap}(t) = \int_{t_0}^t dt' \frac{\sin \omega_a (t-t')}{\omega_a} \left(- \sum_i [\alpha_3 g_{3i}(t') - \alpha_1 \dot{g}_{4i}(t')] \right) \quad (2.12a)$$

$$X_{bp}(t) = \int_{t_0}^t dt' \frac{\sin \omega_b (t-t')}{\omega_b} \left(- \sum_i [\alpha_4 g_{4i}(t') - \alpha_2 \dot{g}_{3i}(t')] \right) \quad (2.12b)$$

Für die weitere Rechnung ist es zweckmäßig, den Liouville-Operator einzuführen, dessen Eigenschaften noch kurz erwähnt werden sollen:

Für eine Funktion $A(x(t), p(t))$, die nicht explizit von der Zeit abhängt, gilt für die Zeitableitung, wenn H die Hamiltonfkt. des Systems ist:

$$\dot{A}(t) = \dot{A}(x(t), p(t)) = \{A(x, p), H\} =: iL A(t) \quad (2.13)$$

L ist der Liouville-Operator. Die Lösung läßt sich formal schreiben als:

$$A(t) = e^{iL(t-t')} A(t') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t-t')^n}{n!} \underbrace{\{ \dots \{A(t'), H\}, H\}, \dots H\}}_{n\text{-mal}} \quad (2.14)$$

Wegen der Eigenschaft der Poisson-Klammern:

$$\{uv, w\} = \{u, w\}v + u\{v, w\} \quad (2.15)$$

und

$$\{e^{iL(t-t')}, H\} = 0 \quad (2.16)$$

gilt:

$$\dot{A}(t) = \frac{d}{dt} e^{iL(t-t')} A(t') = e^{iL(t-t')} \{A(t'), H\} = \{e^{iL(t-t')} A(t'), H\} \quad (2.17)$$

Die letzte Beziehung zeigt, daß der Operator $e^{iL(t-t')}$, das klassische Analogon zum quantenmechanischen Zeitentwicklungsoperator, in die Poisson-Klammer geschoben werden kann, daß es also gleichgültig ist, ob man die zeitliche Entwicklung der Zeitableitung von $A(t')$ betrachtet oder ob man die Zeitentwicklung von $A(t')$ zur Zeit t ableitet.

II.3 Bewegungsgleichungen für $\vec{x}(t)$ und $\vec{p}(t)$

Um (2.12) weiter berechnen zu können, ist es notwendig, die Bewegungsgleichungen der $g_{xi}(t)$ aufzustellen und ihre Lösung zu berechnen. Entsprechend zu (2.13) erhält man für die Zeitableitungen der Bad-Hamilton-Funktion $H_B(t)$ und für $\dot{g}_{xi}(t)$:

$$\frac{d}{dt} H_B(\vec{x}, \vec{p}) = \{H_B, V_{aB}\} + \{H_B, V_{bB}\} = \sum_i PK^i(H_B, t) \quad (2.18)$$

$$\frac{d}{dt} g_{xi}(t) = \{g_{xi}(t), H_B(t)\} + PK^i(g_{xi}, t) \quad (2.19)$$

mit der Abkürzung:

$$PK^i(X, t) = \alpha_1 p_a(t) \{X(t), g_{1i}(t)\} + \alpha_2 p_b(t) \{X(t), g_{2i}(t)\} \\ + m \alpha_3 x_a(t) \{X(t), g_{3i}(t)\} + m \alpha_4 x_b(t) \{X(t), g_{4i}(t)\} \quad (2.20)$$

Wegen $H_B(\vec{x}, \vec{p}) = H_B^0(\vec{x}^0, \vec{p}^0)$ für $t < t_0$ erhält man als Integralform von (2.18):

$$H_B(\vec{x}, \vec{p}) = H_B^0(\vec{x}^0, \vec{p}^0) + H_B^I(t) = H_B^0(\vec{x}^0, \vec{p}^0) + \sum_i \int_{t_0}^t dt' PK^i(H_B, t') \quad (2.21)$$

Dies läßt sich in (2.19) einsetzen und man erhält als Integral von (2.19) (siehe Anhang A1):

$$g_{xi}(t) = g_{xi}^0(x_i^0(t), p_i^0(t)) \\ + \int_{t_0}^t dt' e^{iL_B^0(t-t')} \left[PK^i(g_{xi}, t') + \sum_j \int_{t_0}^{t'} dt'' \{g_{xi}(t'), PK^j(H_B, t'')\} \right] \quad (2.22)$$

was sich leicht durch Zeitdifferentiation nachprüfen läßt, wenn man berücksichtigt, daß L_B^0 der zu H_B^0 gehörende Liouville-Operator ist und die Beziehung:

$$\dot{g}_{xi}(t) = iL_B^0 g_{xi}(x_i^0(t), p_i^0(t))$$

gilt, und die Gleichungen (2.13) und (2.17) zu Hilfe nimmt. Mit der Darstellung Gl.(2.22) von $g_{xi}(t)$ sowie deren Zeitableitungen kann man in

die Gln.(2.12a,b) gehen und erhält somit eine vollständige Beschreibung für die partikulären Lösungen $x_{ap}(t)$ bzw. $x_{bp}(t)$. Dies ist aber nicht zweckmäßig, da man i.A. keine Aussagen über das Verhalten der Bad-Freiheitsgrade machen kann. Da es das Ziel ist, lineare Dämpfung des Oszillatorsystems zu beschreiben, genügt es, Näherungen einzuführen, in denen das Bad über seine Mittelwerte beschrieben wird.

II.4 Näherung und Linearisierung der Bewegungsgleichungen in x_a und x_b

Setzt man nun (2.22) in die Bewegungsgleichungen für $x_a(t)$ bzw. $x_b(t)$ ein, erhält man:

$$\ddot{x}_a(t) + \omega_a^2 x_a(t) = f_1(t) - \sum_i (\alpha_3 \dot{q}_{3i}^1(t) - \alpha_1 \dot{q}_{1i}^1(t)) \quad (2.23a)$$

$$\ddot{x}_b(t) + \omega_b^2 x_b(t) = f_2(t) - \sum_i (\alpha_4 \dot{q}_{4i}^1(t) - \alpha_2 \dot{q}_{2i}^1(t)) \quad (2.23b)$$

mit:

$$f_1(t) = \sum_i [\alpha_1 \dot{q}_{1i}^0(x_i^0(t), p_i^0(t)) - \alpha_3 \dot{q}_{3i}^0(x_i^0(t), p_i^0(t))] \quad (2.24a)$$

$$f_2(t) = \sum_i [\alpha_2 \dot{q}_{2i}^0(x_i^0(t), p_i^0(t)) - \alpha_4 \dot{q}_{4i}^0(x_i^0(t), p_i^0(t))] \quad (2.24b)$$

$$\dot{q}_{3i}^1(t) = \int_{t_0}^t dt' e^{iL_B^0(t-t')} [PK^i(q_{3i}, t') + \sum_j \int_{t_0}^{t'} dt'' \{q_{3i}(t''), PK^j(H_B, t'')\}] \quad (2.24c)$$

Multipliziert man beide Seiten von (2.23a,b) mit m , so steht auf den rechten Seiten die Kraft, die durch die Wechselwirkung der Badteilchen auf den Oszillator "a" bzw. "b" wirkt. Dabei beschreibt $mf_1(t)$ bzw. $mf_2(t)$ die Kraft, die vom Bad auf die Oszillatoren zum Zeitpunkt t wirken würde, wenn sich die Badteilchen unbeeinflusst von den Oszillatoren bewegten. Sie entsteht durch Stöße, die durch die ungeordnete Bewegung der Badteilchen verursacht werden, sie beschreibt also den Einfluss der Bad-Fluktuationen auf die Oszillatoren. Da das Bad homogen sein soll, wird sich trotz der Unregelmäßigkeit der Stöße ergeben, daß über einen längeren Beobachtungszeitraum die Kraft auf die Oszillatoren von allen Seiten gleichmäßig ausgeübt wird, der Mittelwert der Kraft wird also verschwinden:

$$\langle f_{1/2}(t) \rangle_H = \langle f_{1/2}(t) \rangle_{H_B^0} = 0 \quad (2.25)$$

Der zweite Term in (2.23a,b), der proportional zu den $g_{ji}^1(t)$ bzw. ihren Zeitableitungen ist, drückt die Änderung der Kraft aus, die durch die Rückkopplung des Oszillatorsystems auf das Bad entsteht. Die Zeitintegration in $g_{ji}^1(t)$ (Gl. (2.24c)) vom Beginn der Wechselwirkung bis zum Beobachtungszeitpunkt t bedeutet, daß alle Rückkopplungseffekte in diesem Zeitintervall aufsummiert werden. Da die Masse der Badteilchen wesentlich kleiner als die der Oszillatoren angenommen wird, und man ferner annehmen kann, daß sie miteinander wesentlich öfter wechselwirken als mit den Oszillatoren, wird sich im Bad nach der Wechselwirkung sehr schnell ein neuer Gleichgewichtszustand ausbilden, der durch die Dichtefunktion $\rho_B(t) = e^{-\beta H_B(t)/Z_B}$ beschrieben werden kann. Ist also das Zeitintervall $t-t_0$ in (2.24c) groß genug, durchläuft $g_{ji}^1(t)$ eine Serie von Gleichgewichtszuständen, und die Kraft, die das Oszillatorsystem spürt, wird durch den Mittelwert von $g_{ji}^1(t)$ bestimmt. Es ist also berechtigt, die jeweils zweiten Terme in (2.23) durch ihre Mittelwerte zu ersetzen:

$$\ddot{x}_a(t) + \omega_a^2 x_a(t) = f_1(t) - \sum_i [\alpha_3 \langle g_{3i}^1(t) \rangle_{H_B} - \alpha_1 \langle g_{1i}^1(t) \rangle_{H_B}] \quad (2.26a)$$

$$\ddot{x}_b(t) + \omega_b^2 x_b(t) = f_2(t) - \sum_i [\alpha_4 \langle g_{4i}^1(t) \rangle_{H_B} - \alpha_2 \langle g_{2i}^1(t) \rangle_{H_B}] \quad (2.26b)$$

Auf der rechten Seite der Bewegungsgleichungen steht nun in $f_1(t)$ bzw. $f_2(t)$ die stochastische Beschleunigung, die durch die schnell fluktuierende Umgebung verursacht wird, der systematische Anteil, der für eine zusätzliche Beschleunigung oder Verzögerung sorgt, wird durch die zweiten Terme beschrieben.

Die Stärke der Wechselwirkung eines Badteilchens mit den Oszillatoren wird durch die Abstandsfunktion bestimmt, die in den $g_{ji}(t)$ enthalten ist. In diesem Modell werden nur Badteilchen in unmittelbarer Umgebung der Oszillatoren mit diesen wechselwirken, weit entfernte Badteilchen werden sich ungestört verhalten. Die Zahl der mit den Oszillatoren wechselwirkenden Teilchen wird daher klein sein, verglichen mit der Zahl der Bad-Freiheitsgrade. Dies drückt sich darin aus, daß sich z.B. die Temperatur des Bades praktisch nicht ändert, d.h., die Bad-Hamiltonfunktion wird nur schwach gestört. Dies gestattet wiederum, sich auf die lineare Näherung des Wechselwirkungsanteils der Bad-Hamiltonfunktion $H_B^1(t)$ zu

beschränken. Dies bedeutet aber auch, daß sich die Verteilungsfunktion $g_B(t)$ durch die Störung kaum ändert, und es genügt, die Mittelwerte der Bad-Orte und -Impulse sowie der davon abhängigen Größen in linearer Näherung zu betrachten, obwohl ein einzelnes Bad-Teilchen durch die Kopplung an die Oszillatoren eine sehr große Änderung erfahren kann, und zwischen den Bad-Teilchen selbst stark nichtlineare Wechselwirkungen stattfinden können. Da die $PK^i(.,t)$ schon mindestens linear in den α_j sind, kann man in den $g_{ji}^1(t)$ die gestörten Größen durch die entsprechenden ungestörten Ausdrücke ersetzen und die Mittelung mit der Dichtefunktion g_B^0 (Gl.2.26) durchführen. Aus dem Mittelwert einer Funktion $A(\vec{x}^0, \vec{p}^0)$:

$$\langle A(\vec{x}^0, \vec{p}^0) \rangle_{H_B^0} = \int d\vec{x}^0 d\vec{p}^0 g_B^0 A(\vec{x}^0, \vec{p}^0) \quad (2.27)$$

erhält man:

$$\langle \{H_B^0, A(\vec{x}^0, \vec{p}^0)\} \rangle_{H_B^0} = \int d\vec{x}^0 d\vec{p}^0 A(\vec{x}^0, \vec{p}^0) \{e^{-\beta H_B^0}, H_B^0\} = 0 \quad (2.28)$$

und damit:

$$\langle e^{iL_B^0(t-t')} A(\vec{x}^0, \vec{p}^0) \rangle_{H_B^0} = \langle A(\vec{x}^0, \vec{p}^0) \rangle_{H_B^0} \quad (2.29)$$

Berücksichtigt man noch, daß mit $Y = p_a, p_b, x_a, x_b$:

$$\begin{aligned} \langle \{g_{ji}^0(t'), Y(t'') \{H_B^0, g_{ji}^0(t'')\}\} \rangle_{H_B^0} &= Y(t'') \langle \{g_{ji}^0(t'), \{H_B^0, g_{ji}^0(t'')\}\} \rangle_{H_B^0} \\ &+ 0(\alpha) \end{aligned} \quad (2.30)$$

erhält man in linearer Näherung für $\langle g_{ji}^1(t) \rangle_{H_B^0}$ in Gl.(2.24c) mit der Gl.(2.20) für $PK^i(X,t)$:

$$\begin{aligned} \langle g_{ji}^1(t) \rangle_{H_B^0} &= \int_{t_0}^t dt' [\alpha_1 p_a(t') \langle \{g_{ji}^0(t'), g_{ji}^0(t'')\} \rangle_{H_B^0} + \alpha_2 p_b(t') \langle \{g_{ji}^0(t'), g_{ji}^0(t'')\} \rangle_{H_B^0} \\ &+ m\alpha_3 x_a(t') \langle \{g_{ji}^0(t'), g_{ji}^0(t'')\} \rangle_{H_B^0} + m\alpha_4 x_b(t') \langle \{g_{ji}^0(t'), g_{ji}^0(t'')\} \rangle_{H_B^0}] \\ &+ \sum_j \int_{t_0}^{t'} dt' dt'' [\alpha_1 p_a(t'') \langle \{g_{ji}^0(t'), \{H_B^0, g_{ji}^0(t'')\}\} \rangle_{H_B^0} \\ &+ \alpha_2 p_b(t'') \langle \{g_{ji}^0(t'), \{H_B^0, g_{ji}^0(t'')\}\} \rangle_{H_B^0} \\ &+ m\alpha_3 x_a(t'') \langle \{g_{ji}^0(t'), \{H_B^0, g_{ji}^0(t'')\}\} \rangle_{H_B^0} \\ &+ m\alpha_4 x_b(t'') \langle \{g_{ji}^0(t'), \{H_B^0, g_{ji}^0(t'')\}\} \rangle_{H_B^0}] \end{aligned} \quad (2.31)$$

Die Poisson-Klammer-Ausdrücke in (2.31) lassen sich noch in einfacherer Form darstellen. Für zwei Funktionen $A(t)$ und $B(t)$, die nur über ihre dynamischen Variablen $x(t)$ und $p(t)$ von der Zeit abhängen, gilt folgender Zusammenhang: Ist $S_{AB}(t, t')$ die Korrelationsfunktion

$$S_{AB}(t, t') = \langle B(t) \cdot A(t') \rangle \quad (2.32)$$

dann gilt:

$$\frac{\partial}{\partial t} S_{AB}(t, t') = \frac{1}{\beta} \langle \{B(t), A(t')\} \rangle \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} S_{AB}(t, t') = \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{\beta} \langle \{B(t), A(t')\} \rangle = \frac{1}{\beta} \langle \{B(t), \{H, A(t')\}\} \rangle \quad (2.34)$$

wenn H die Hamiltonfunktion des Systems ist. Dies läßt sich sofort für Gl.(2.31) verwenden. Definiert man:

$$S_{\beta\gamma}^{ij}(t, t') = \langle \dot{q}_{\beta i}^{\circ}(t) \cdot \dot{q}_{\gamma j}^{\circ}(t') \rangle_{H_B^{\circ}} \quad \beta, \gamma = 1, \dots, 4 \quad (2.35)$$

erhält man durch Einsetzen in Gl.(2.31):

$$\begin{aligned} \langle \dot{q}_{\beta i}^{\circ}(t) \rangle_{H_B^{\circ}} &= \beta \int_{t_0}^t dt' [\alpha_1 p_a(t') \frac{\partial}{\partial t'} S_{\beta 1}^{ii}(t', t') + \alpha_2 p_b(t') \frac{\partial}{\partial t'} S_{\beta 2}^{ii}(t', t') \\ &\quad + m \alpha_3 x_a(t') \frac{\partial}{\partial t'} S_{\beta 3}^{ii}(t', t') + m \alpha_4 x_b(t') \frac{\partial}{\partial t'} S_{\beta 4}^{ii}(t', t')] \\ &+ \beta \sum_j \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' [\alpha_1 p_a(t'') \frac{\partial^2}{\partial t'^2} S_{\beta 1}^{ij}(t', t'') + \alpha_2 p_b(t'') \frac{\partial^2}{\partial t'^2} S_{\beta 2}^{ij}(t', t'') \\ &\quad + m \alpha_3 x_a(t'') \frac{\partial^2}{\partial t'^2} S_{\beta 3}^{ij}(t', t'') + m \alpha_4 x_b(t'') \frac{\partial^2}{\partial t'^2} S_{\beta 4}^{ij}(t', t'')] \end{aligned} \quad (2.36)$$

Zur weiteren Berechnung von (2.36) müssen die $S_{\beta\gamma}^{ij}(t, t')$ näher betrachtet werden. Da die Mittelwerte der stochastischen Kräfte verschwinden, gilt auch $\langle \dot{q}_{\beta i}^{\circ}(t) \rangle_{H_B^{\circ}} = 0$, die $S_{\beta\gamma}^{ij}(t, t')$ beschreiben somit die Korrelation der Gewichtsfunktionen zu den Badteilchen i und j . Wegen

$$S_{\beta\gamma}^{ij}(t, t') = \langle \dot{q}_{\beta i}^{\circ}(0) e^{-iL_B^{\circ}(t-t')} \dot{q}_{\gamma j}^{\circ}(0) \rangle_{H_B^{\circ}} \quad (2.37)$$

sind sie nur Funktionen der Zeitdifferenz $t-t'$. Insbesondere gelten folgende Symmetrierelationen [40]:

$$S_{\beta\gamma}^{ij}(t-t') = S_{\beta\gamma}^{ij}(t'-t) = S_{\gamma\beta}^{ji}(t-t') \quad (2.38)$$

Die Zeitableitung ist durch Gl.(2.33) gegeben, die eine Form des Fluktuations-Dissipations-Theorems [38,39,40] beschreibt. Zu gleichen Zeiten erhält man:

$$\frac{\partial}{\partial t} S_{\beta\gamma}^{ij}(t, t) = \frac{1}{\beta} \langle \{ g_{\beta i}^0(x_i^0(0), p_i^0(0)), g_{\gamma j}^0(x_j^0(0), p_j^0(0)) \} \rangle_{H_B} = 0 \quad (2.39)$$

da $S_{\beta\gamma}^{ij}(t, t)$ nicht mehr von der Zeit t abhängt. Damit verschwindet auch der erste Integralterm in Gl.(2.36).

Setzt man voraus, daß das Bad ein Gas ist, also aus sehr schnell fluktuierenden Teilchen besteht, so kann man weitere Aussagen über die Korrelationsfunktion machen. Die Gewichtsfunktion $g_{\gamma i}(t)$, die letztlich die Kraft auf die Oszillatoren beschreibt, ist abhängig von der raschen und chaotischen Bewegung der Badteilchen, die zwischen zwei Stößen mit den Oszillatoren sehr oft miteinander wechselwirken. Sie verlieren daher sehr schnell die Erinnerung an ihr früheres Verhalten, die Korrelation zwischen den Badteilchen und damit auch die der abgeleiteten Größen wird sich nur für extrem kurze Zeiten von Null unterscheiden, so daß man die stochastische Natur der Korrelation $S_{\beta\gamma}^{ij}(t, t')$ durch folgenden Ansatz beschreiben kann:

$$S_{\beta\gamma}^{ij}(t, t') = C_{\beta\gamma}^{ij} \delta(t - t') \quad (2.40)$$

Dabei ist $C_{\beta\gamma}^{ij}$ eine Konstante in der Zeit, enthält aber noch Ortskorrelationen, die abhängig sind von der Reichweite des Wechselwirkungspotentials eines Badteilchens. Mit der Beziehung (2.40) läßt sich nun $\langle g_{\gamma i}^1(t) \rangle$ in Gl.(2.36) weiter berechnen, man erhält (siehe auch Anhang A2):

$$\langle g_{\gamma i}^1(t) \rangle_{H_B} = \frac{1}{2} \beta \sum_j \int_{t_0}^t dt' [\alpha_1 C_{\gamma 1}^{ij} \ddot{p}_a(t') + \alpha_2 C_{\gamma 2}^{ij} \ddot{p}_b(t') + m(\alpha_3 C_{\gamma 3}^{ij} \ddot{x}_a(t') + \alpha_4 C_{\gamma 4}^{ij} \ddot{x}_b(t'))]$$

Da für $t=t_0$ die Wechselwirkung adiabatisch einsetzt, das Oszillatorsystem also in Ruhe ist ($\dot{p}_a(t_0)=\dot{p}_b(t_0)=\dot{x}_a(t_0)=\dot{x}_b(t_0)=0$), bekommt man:

$$\langle g_{\gamma i}^1(t) \rangle_{H_B} = \frac{1}{2} \beta \sum_j (\alpha_1 C_{\gamma 1}^{ij} \dot{p}_a(t) + \alpha_2 C_{\gamma 2}^{ij} \dot{p}_b(t) + m \alpha_3 C_{\gamma 3}^{ij} \dot{x}_a(t) + m \alpha_4 C_{\gamma 4}^{ij} \dot{x}_b(t))$$

In der linearen Näherung ist $\dot{p}_{a/b}(t) = -m \omega_{a/b}^2 x_{a/b}(t)$, so daß man die endgültige Form erhält:

$$\begin{aligned} \langle g_{\gamma i}^1(t) \rangle_{H_B} = \frac{m}{2} \beta \sum_j & (-\alpha_1 \omega_a^2 C_{\gamma 1}^{ij} x_a(t) - \alpha_2 \omega_b^2 C_{\gamma 2}^{ij} x_b(t) \\ & + \alpha_3 C_{\gamma 3}^{ij} \dot{x}_a(t) + \alpha_4 C_{\gamma 4}^{ij} \dot{x}_b(t)) \end{aligned} \quad (2.41)$$

und die Zeitableitung (mit $\ddot{x}_{a/b} = -\omega_{ab}^2 x_{a/b} + O(\alpha)$):

$$\frac{d}{dt} \langle g_{ij}^1(t) \rangle_{H_0} = -\frac{m}{2} \beta \sum_j (\alpha_1 \omega_a^2 C_{j1}^{ij} \dot{x}_a(t) + \alpha_1 \omega_b^2 C_{j2}^{ij} \dot{x}_b(t) + \alpha_3 \omega_a^2 C_{j3}^{ij} \dot{x}_a(t) + \alpha_4 \omega_b^2 C_{j4}^{ij} \dot{x}_b(t)) \quad (2.42)$$

Diese zwei Beziehungen, die nun linear in x_a bzw. x_b sind, lassen sich nun für die Bewegungsgleichungen der Oszillatoren verwenden. Man erhält:

$$\ddot{x}_a(t) + \omega_a^2 x_a(t) = -f_1(t) - \frac{m}{2} \beta \sum_j [\alpha_1 \alpha_3 \omega_a^2 x_a(t) (C_{13}^{ij} - C_{31}^{ij}) + \omega_b^2 x_b(t) (\alpha_1 \alpha_4 C_{14}^{ij} - \alpha_1 \alpha_3 C_{32}^{ij}) + \dot{x}_a(t) (\alpha_3^2 C_{33}^{ij} + \omega_a^2 \alpha_1^2 C_{11}^{ij}) + \dot{x}_b(t) (\alpha_3 \alpha_4 C_{34}^{ij} + \omega_b^2 \alpha_1 \alpha_2 C_{12}^{ij})] \quad (2.43a)$$

$$\ddot{x}_b(t) + \omega_b^2 x_b(t) = -f_2(t) - \frac{m}{2} \beta \sum_j [\alpha_2 \alpha_4 \omega_b^2 x_b(t) (C_{24}^{ij} - C_{42}^{ij}) + \omega_a^2 x_a(t) (\alpha_2 \alpha_3 C_{23}^{ij} - \alpha_1 \alpha_4 C_{41}^{ij}) + \dot{x}_b(t) (\alpha_2^2 C_{44}^{ij} + \omega_b^2 \alpha_2^2 C_{22}^{ij}) + \dot{x}_a(t) (\alpha_3 \alpha_4 C_{43}^{ij} + \omega_a^2 \alpha_1 \alpha_2 C_{21}^{ij})] \quad (2.43b)$$

Wegen der Symmetriebeziehung $C_{\beta\gamma}^{ij} = C_{\gamma\beta}^{ji}$ ist:

$$\sum_j (C_{13}^{ij} - C_{31}^{ij}) = \sum_j (C_{24}^{ij} - C_{42}^{ij}) = 0 \quad (2.44a)$$

$$\sum_j (\alpha_1 \alpha_4 C_{14}^{ij} - \alpha_2 \alpha_3 C_{32}^{ij}) = - \sum_j (\alpha_2 \alpha_3 C_{23}^{ij} - \alpha_1 \alpha_4 C_{41}^{ij}) = c \quad (2.44b)$$

Mit den Bezeichnungen:

$$\begin{aligned} \kappa_a^2 &= -\frac{m}{2} \beta c \omega_b^2, \quad \kappa_b^2 = \frac{m}{2} \beta c \omega_a^2, \quad \hat{\omega}_a^2 = \omega_a^2 - \kappa_a^2, \quad \hat{\omega}_b^2 = \omega_b^2 - \kappa_b^2, \\ k_{2a} &= -\frac{m}{4} \beta \sum_j (\alpha_3 \alpha_4 C_{34}^{ij} + \omega_b^2 \alpha_1 \alpha_2 C_{12}^{ij}), \quad k_{2b} = -\frac{m}{4} \beta \sum_j (\alpha_3 \alpha_4 C_{34}^{ij} + \omega_a^2 \alpha_1 \alpha_2 C_{12}^{ij}), \\ \gamma_a &= \frac{m}{4} \beta \sum_j (\alpha_3^2 C_{33}^{ij} + \omega_a^2 \alpha_1^2 C_{11}^{ij}), \quad \hat{\gamma}_a = \gamma_a - k_{2a}, \\ \gamma_b &= \frac{m}{4} \beta \sum_j (\alpha_2^2 C_{44}^{ij} + \omega_b^2 \alpha_2^2 C_{22}^{ij}), \quad \hat{\gamma}_b = \gamma_b - k_{2b}, \end{aligned} \quad (2.45)$$

kann man nun die Bewegungsgleichungen (2.43) umformen:

$$\begin{aligned} \ddot{x}_a(t) + 2 \hat{\gamma}_a \dot{x}_a(t) + \hat{\omega}_a^2 x_a(t) &= -\kappa_a^2 (x_a(t) - x_b(t)) \\ &\quad - 2 k_{2a} (\dot{x}_a(t) - \dot{x}_b(t)) + f_1(t) \end{aligned} \quad (2.46a)$$

$$\begin{aligned} \ddot{x}_b(t) + 2 \hat{\gamma}_b \dot{x}_b(t) + \hat{\omega}_b^2 x_b(t) &= -\kappa_b^2 (x_b(t) - x_a(t)) \\ &\quad - 2 k_{2b} (\dot{x}_b(t) - \dot{x}_a(t)) + f_2(t) \end{aligned} \quad (2.46b)$$

Mit der Annahme, daß sich die Kräfte, die durch die Badteilchen auf die Oszillatoren wirken, stochastisch verhalten, gelangt man so von der Hamiltonfunktion, wie sie in Gl.(2.3) gegeben ist, zu einem System von linearen Bewegungsgleichungen zweier gedämpfter Oszillatoren, die miteinander verkoppelt sind, wie es sich in einem mechanischen Modell in etwa veranschaulichen läßt (Bild 2). Dabei müssen die Dämpfungsbeiwerte γ_a, γ_b sowie die Kopplungen K_a, K_b und K_{2a}, K_{2b} noch genauer diskutiert werden. Zuvor soll aber noch dieses Modell durch Einführung einer Lagenkopplung zwischen den Oszillatoren vervollständigt werden.

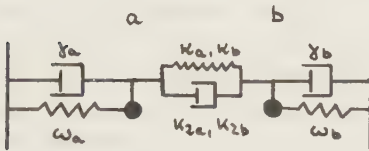


Bild 2: Oszillatormodell
zu Gl.(2.46)

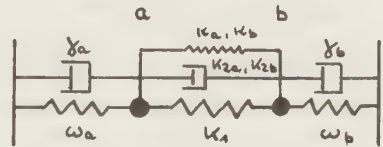


Bild 3: Oszillatormodell
mit Lagenkopplung

II.5 Modell mit Lagenkopplung

Wie oben schon gesagt, beschreibt die Hamiltonfunktion H in (2.3) ein System zweier Oszillatoren, die über die Wechselwirkung mit dem Bad gekoppelt sind. Führt man nun eine direkte Lagenkopplung zwischen den zwei Oszillatoren ein, was im mechanischen Modell durch Bild 3 beschrieben wird, erhält man im ungestörten Fall ($\omega_\gamma=0$) folgende Schwingungsgleichungen:

$$\ddot{x}_a^0(t) + \omega_a^2 x_a^0(t) = -K_1 (x_a^0(t) - x_b^0(t)) \quad (2.47a)$$

$$\ddot{x}_b^0(t) + \omega_b^2 x_b^0(t) = -K_1 (x_b^0(t) - x_a^0(t)) \quad (2.47b)$$

in denen das Quadrat der Kopplungskonstanten K_1 durch die "Federsteifigkeit" der Wechselwirkung zwischen "a" und "b" bestimmt wird. Die dazugehörige Hamiltonfunktion läßt sich folgendermaßen beschreiben:

$$H_{osc}^0 = \frac{p_a^{02}}{2m} + \frac{p_b^{02}}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_a^2 x_a^{02} + \frac{1}{2} m \omega_b^2 x_b^{02} + \frac{1}{2} m K_1 (x_a^0 - x_b^0)^2 \quad (2.48)$$

Wie in Abschnitt II.1 wird nun das Wärmebad angekoppelt, und man erhält die Hamiltonfunktion:

$$H = H_{0sc} + H_B(\vec{x}, \vec{p}) + V_{aB}(x_a, p_a, \vec{x}, \vec{p}) + V_{bB}(x_b, p_b, \vec{x}, \vec{p}) \quad (2.49)$$

mit derselben Bedeutung der einzelnen Summanden wie in II.1. Über die kanonischen Gleichungen führt dies wieder zu den Bewegungsgleichungen:

$$\ddot{x}_a(t) + (\omega_a^2 + K_a^2) \cdot x_a(t) - K_a^2 x_b(t) = - \sum (\alpha_3 q_{3i}(t) - \alpha_1 \dot{q}_{1i}(t)) \quad (2.50a)$$

$$\ddot{x}_b(t) + (\omega_b^2 + K_b^2) \cdot x_b(t) - K_b^2 x_a(t) = - \sum (\alpha_4 q_{4i}(t) - \alpha_2 \dot{q}_{2i}(t)) \quad (2.50b)$$

Man sieht, daß sich die rechte Seite in (2.50a,b) nicht verändert hat gegenüber Gl.(2.10a,b). Da zunächst nur die Bewegungsgleichungen, die man durch die Linearisierung der Mittelwerte der gestörten Badkräfte erhält, von Interesse sind, kann man auf der rechten Seite von (2.50a,b) für die $g_{yi}(t)$ und ihre Zeitableitungen die Näherungsformeln (2.41) und (2.42) verwenden, die dann wieder durch Einsetzen in (2.50) zu folgenden Bewegungsgleichungen führen:

$$\ddot{x}_a + 2\hat{g}_a \dot{x}_a + \hat{\omega}_a^2 x_a = - K_{1a}^2 (x_a - x_b) - 2 K_{2a} (\dot{x}_a - \dot{x}_b) + f_1(t) \quad (2.51a)$$

$$\ddot{x}_b + 2\hat{g}_b \dot{x}_b + \hat{\omega}_b^2 x_b = - K_{1b}^2 (x_b - x_a) - 2 K_{2b} (\dot{x}_b - \dot{x}_a) + f_2(t) \quad (2.51b)$$

mit $K_{1a}^2 = K_a^2 + \kappa_a^2$, $K_{1b}^2 = K_b^2 + \kappa_b^2$ und $\hat{g}_a, \hat{g}_b, \hat{\omega}_a, \hat{\omega}_b, K_{2a}, K_{2b}$ aus Gl.(2.45). Die Bewegungsgleichungen (2.51a,b) unterscheiden sich also nur im Beitrag zur Lagenkopplung von den Gln.(2.46a,b). Mit der Hamiltonfunktion (2.49) hat man also eine konservative Hamiltonfunktion gefunden, die ein gekoppeltes dissipatives System zweier harmonischer Oszillatoren beschreibt. Unter der Annahme der oben aufgeführten Näherungen erhält man daraus die Bewegungsgleichungen, in denen die Dämpfungsbeiwerte und Kopplungen Konstanten der Zeit sind. Dieses Gleichungssystem kann nun gelöst werden, da es möglich ist, mit dem zu H aus Gl.(2.49) gehörenden Liouville-Operator die zeitliche Entwicklung des Systems zu beschreiben, was im nächsten Kapitel geschehen soll.

Zuvor ist es aber notwendig, die Bedeutung der Kopplungen α_y zu diskutieren und den Zusammenhang zwischen den makroskopischen Größen $\hat{g}_a, \hat{g}_b, K_{1a}, K_{1b}, K_{2a}$ und K_{2b} zu erläutern.

II.6 Bedeutung der Kopplungsterme $\alpha_p \alpha_q C_{pq}^{ij}$, Zusammenhang mit der Statistik

Die Kopplungsstärken α_1 und α_3 , wie sie in (2.7) eingeführt wurden, beschreiben die Kopplung zwischen dem Ort bzw. Impuls des Oszillators "a" und den Orten und Impulsen des Badteilchens "i", das über die Gewichtsfunktion $g_{1i1}(t)$ mit α_1 und α_3 verknüpft ist. Die $g_{ij}(t)$ hängen vom Abstand des Teilchens "i" vom Gleichgewichtswert des Oszillators "a" ab, so daß Badteilchen in nächster Umgebung des Oszillators stark wechselwirken, weiter entfernte Teilchen jedoch keinen Beitrag geben. Analog gilt dies für α_2 und α_4 mit Oszillator "b". Um sich den Mechanismus der Kopplung noch einmal vor Augen zu führen, kann man ein vereinfachtes Modell betrachten, in dem z.B. die Kopplungen über p_a bzw. p_b ausgeschaltet sind, d.h. α_1 und α_2 verschwinden. Nimmt man ferner an, daß die Teilchen "a" und "b" nicht an eine Ruhelage gebunden sind, also $\omega_a = \omega_b = 0$, und keine Lagenkopplung besteht, erhält man aus den Gln.(2.51):

$$m \ddot{x}_a(t) = -2m \gamma_a \dot{x}_a(t) + 2m K_V \dot{x}_b(t) + m f_1(t) \quad (2.52a)$$

$$m \ddot{x}_b(t) = -2m \gamma_b \dot{x}_b(t) + 2m K_V \dot{x}_a(t) + m f_2(t) \quad (2.52b)$$

$$\text{mit: } \gamma_a = \frac{m}{4} \beta \sum_i \alpha_3^2 C_{33}^{ii}, \gamma_b = \frac{m}{4} \beta \sum_i \alpha_4^2 C_{44}^{ii}, K_V = K_{2a} = K_{2b} = -\frac{m}{4} \beta \sum_{ij} \alpha_3 \alpha_4 C_{34}^{ij}$$

$$f_1(t) = -\sum_i \alpha_3 g_{3i}^0(t), \quad f_2(t) = -\sum_i \alpha_4 g_{4i}^0(t) \quad (2.52c)$$

Auf den linken Seiten von (2.52a,b) steht nun die Kraft, die auf das Teilchen "a" bzw. "b" ausgeübt wird. Betrachtet man das Teilchen "a", so erleidet es zunächst eine Kraft durch Stöße mit den fluktuierenden Badteilchen. War das Teilchen in Ruhe, wird es dadurch beschleunigt und führt zufällige Bewegungen aus, entsprechend den stochastischen Stößen, die durch den Term $m f_1(t)$ beschrieben werden. Über einen langen Zeitraum betrachtet, erfolgen die Stöße wegen der Homogenität des Bades von allen Seiten, im Mittel wird sich das Teilchen nicht bewegen, der Mittelwert von $f_1(t)$ verschwindet also. Entsprechendes gilt für das Teilchen "b". Wirkt nun eine äußere Kraft auf "a", tritt zu den zufälligen Stößen ein systematischer Anteil, da in Richtung der Beschleunigung die Zahl der Stöße mit den Badteilchen vor dem Teilchen "a" größer ist als hinter "a". Das Teilchen "a" wird durch einen Stoß mit dem Badteilchen "i" abgebremst, wobei noch zu berücksichtigen ist, daß zwei Badteilchen örtlich korreliert

sein können. Diese Badteilchen verteilen dann die aufgenommene Energie über Stöße untereinander, so daß die kinetische Energie des Teilchens "a" über den Term:

$$-2 m \gamma_a \dot{x}_a(t)$$

in das Bad dissipiert. Gleichzeitig wird jedoch ein Teil der von "a" getroffenen Badteilchen in der Lage sein, das Teilchen "b" zu erreichen und mit ihm zu stoßen. Da durch die Abbremsung von "a" für diese Badteilchen eine gemeinsame Komponente in Bewegungsrichtung von "a" besteht, wird dadurch "b" in derselben Richtung beschleunigt. Damit hat eine Energieübertragung von "a" nach "b" über den Dissipationsmechanismus stattgefunden. Die von "a" abgegebene Energie ist abhängig von der Größe und der Richtung der Geschwindigkeitsdifferenz von "a" und "b" und läßt sich durch den Term

$$-2 m K_{2a}(\dot{x}_a(t) - \dot{x}_b(t))$$

in (2.52a) beschreiben. Ist nun das Teilchen "b" beschleunigt worden, tritt entsprechend der oben beschriebene Vorgang der Energieübertragung und Dissipation auf, wobei der Term

$$-2 m K_{2b}(\dot{x}_b(t) - \dot{x}_a(t))$$

in (2.52b) die Dissipation verstärken kann, wenn $\dot{x}_b(t) > \dot{x}_a(t)$ gilt. Insgesamt wird dadurch das System abgebremst und kommt zur Ruhe. Läßt man den stochastischen Anteil der Bewegung von $x_a(t)$ und $x_b(t)$ außer acht, d.h. setzt man die Mittelwerte in (2.52a,b) ein, so erhält man für die Energie des Systems "a+b" zum Zeitpunkt t ($K_{2a}=K_{2b}=K_V$):

$$\bar{E}(t) = \frac{m}{2} (\langle \dot{x}_a(t) \rangle^2 + \langle \dot{x}_b(t) \rangle^2) = \frac{m}{2} (\langle \dot{x}_a(t_0) \rangle^2 + \langle \dot{x}_b(t_0) \rangle^2) - 2m \int_{t_0}^t dt' \underline{\dot{x}}^T \underline{\tilde{\Gamma}} \underline{\dot{x}} \quad (2.53a)$$

mit

$$\underline{\dot{x}} = \begin{pmatrix} \langle \dot{x}_a(t') \rangle \\ \langle \dot{x}_b(t') \rangle \end{pmatrix}, \quad \underline{\tilde{\Gamma}} = \begin{pmatrix} \gamma_a & -K_V \\ -K_V & \gamma_b \end{pmatrix}$$

oder

$$\bar{E}(t) = \frac{m}{2} \langle \dot{x}_a(t_0) \rangle^2 - 2m \int_{t_0}^t dt' [(\gamma_a - K_V) \langle \dot{x}_a(t') \rangle^2 + (\gamma_b - K_V) \langle \dot{x}_b(t') \rangle^2] + \frac{m}{2} \langle \dot{x}_b(t_0) \rangle^2 - 2m K_V \int_{t_0}^t dt' [\langle \dot{x}_a(t') \rangle - \langle \dot{x}_b(t') \rangle]^2 \quad (2.53b)$$

Das erste Integral in (2.53b) beschreibt die Dissipation der Energie aus dem System "a+b", während das zweite Integral die durch die Kopplung ausgetauschte Energie darstellt, die aber im System verbleibt. Damit läßt sich die Wahl der Vorzeichen erklären, wie sie schon in (2.45) und (2.52c) angenommen wurden. Die Dämpfungskonstanten sind dabei größer als Null, da dem System Energie entzogen wird, während die Geschwindigkeitskopplung in

diesem System negativ ist und damit den Beitrag des zweiten Integrals positiv macht. Diese Wahl des Vorzeichens für K_V wird in allen Systemen zu treffen sein, in denen sich das Bad als neutrales, homogenes Medium darstellt, insbesondere bei Systemen von gleichartigen Teilchen "a" und "b", wo z.B. in (2.52c) $\alpha_3 = \alpha_4$ ist und somit $\gamma_a = \gamma_b > 0$ und $K_V < 0$. Das Vorzeichen von K_{2a} bzw. K_{2b} kann sich ändern, wenn das Bad inhomogen wird, wenn es z.B. an einem Punkt geheizt wird und aktiv Energie auf die Teilchen "a" und "b" überträgt. Dies ist aber nicht Gegenstand der hier beabsichtigten Untersuchung, so daß bei Beispielen zur Anwendung nur Kopplungen mit $K_V < 0$ behandelt werden.

Mit $\beta = 1/kT$ und über die Korrelationsfunktionen $C_{\beta\gamma}^{ij}$ hängen die Dämpfungs- und Kopplungskonstanten von der Temperatur ab. Für die Korrelationsfunktionen der stochastischen Kräfte $m f_1(t)$ und $m f_2(t)$ erhält man nach den Gln.(2.37) und (2.40) mit $\beta, \gamma = 3, 4$:

$$m^2 \langle f_{\beta-2}(t) \cdot f_{\gamma-2}(t') \rangle_{H_B^0} = m^2 \sum_{ij} \alpha_{\beta} \alpha_{\gamma} \langle g_{\beta i}^0(t) g_{\gamma j}^0(t') \rangle_{H_B^0} = m^2 \alpha_{\beta} \alpha_{\gamma} \sum_{ij} C_{\beta\gamma}^{ij} \delta(t-t')$$

Damit erhält man mit Gl.(2.52c):

$$\gamma_a = \frac{\beta}{4m} \int_{-\infty}^{\infty} \langle f_1(t_0+t) f_1(t_0) \rangle_{H_B^0} dt \quad (2.54a)$$

$$\gamma_b = \frac{\beta}{4m} \int_{-\infty}^{\infty} \langle f_2(t_0+t) f_2(t_0) \rangle_{H_B^0} dt \quad (2.54b)$$

$$K_V = K_{2a} = K_{2b} = -\frac{\beta}{4m} \int_{-\infty}^{\infty} \langle f_1(t_0+t) f_2(t_0) \rangle_{H_B^0} dt \quad (2.54c)$$

Damit ergibt sich unmittelbar der Zusammenhang mit der Statistik. Sind nämlich die Oszillatoren "a" und "b" sehr weit voneinander entfernt, verschwindet die Korrelation zwischen $f_1(t)$ und $f_2(t)$. Damit verschwinden K_{2a} und K_{2b} , und man erhält aus den Bewegungsgleichungen (2.52) zwei entkoppelte Gleichungen:

$$\begin{aligned} \ddot{x}_a(t) &= -\gamma_a \dot{x}_a(t) + f_1(t) \\ \ddot{x}_b(t) &= -\gamma_b \dot{x}_b(t) + f_2(t) \end{aligned} \quad (2.55)$$

die jeweils die Langevin-Gleichung eines freien Brown'schen Teilchens in einer Dimension darstellen [38]. Ihre Gültigkeit setzt voraus, daß der Prozess $f_{1,2}(t)$ ein Gauss-Markoff-Prozess ist, und die Korrelationszeiten unendlich klein sind. Diese Voraussetzungen wurden in den letzten

Abschnitten benutzt, um aus der Hamiltonfunktion H (2.3) Bewegungsgleichungen mit konstanten Dämpfungsbeiwerten zu erhalten, so daß im Rahmen dieser Rechnung nur dissipative Prozesse beschrieben werden können, bei denen die Brown'schen Teilchen eine sehr viel größere Masse als die Badteilchen besitzen, ihre Zeitskala also wesentlich größer ist als die der Badteilchen. Für andere Prozesse ist diese Näherung nicht zulässig, da man dann eine zeitabhängige Dämpfung erhält. Diese Prozesse sind prinzipiell in der Hamiltonfunktion (2.3) enthalten, es müssen dann aber höhere Terme als die linearen im Näherungsverfahren berücksichtigt werden.

Die Dissipation der Energie vom Oszillatorsystem ins Bad wird durch den Integralterm in (2.53a) ausgedrückt (siehe auch Anhang A5). Von den Modellannahmen her muß man fordern, daß der Ausdruck $\dot{x}^T \tilde{\Gamma} \dot{x}$ positiv oder Null ist, so daß die Dissipationsmatrix $\tilde{\Gamma}$ eine positive Matrix ist. Damit folgt, daß die Determinante $\det(\tilde{\Gamma}) \geq 0$ ist, was für die Geschwindigkeitskopplung die Beziehung

$$K_V^2 \leq \gamma_a \cdot \gamma_b \quad (2.56)$$

ergibt. Das Gleichheitszeichen wird erreicht, wenn jedes Badteilchen, das von "a" gestoßen wird, auf "b" trifft und umgekehrt. Stellt man sich wiederum das Wärmebad als Gas vor, in dem zwei größere Teilchen eingebettet sind, wird die maximale Kopplung

$$K_{Vmax} = -\sqrt{\gamma_a \gamma_b}$$

erreicht werden, wenn "a" und "b" in einer Distanz liegen, die in der Größenordnung der freien Weglänge eines Badmoleküls liegt. Dies bedeutet, daß die Dichte des Bades hinreichend klein sein muß, um dies zu erreichen, andererseits so groß sein muß, daß sich durch die Wechselwirkung der Badmoleküle hinreichend schnell ein Gleichgewicht einstellen kann, die Voraussetzung zur Behandlung des Ensembles als Brown'sches Gas somit erfüllt sind. Es ist also zu erwarten, daß es einen optimalen Arbeitspunkt gibt, der abhängig ist vom Partialdruck des Badgases.

Durch Hinzunahme anderer Wechselwirkungen über α_1 und α_2 sowie durch Einführung von Potentialen und einer Lagenkopplung ändert sich nichts an der obigen Betrachtung. Es kann aber in den Bewegungsgleichungen (2.51a,b) noch ein Beitrag zur Lagenkopplung kommen, der durch die gegenseitige Beeinflussung der verschiedenen Wechselwirkungen entstehen kann. Seine Größe wird durch

$$c = \sum_{ij} (\alpha_1 \alpha_4 C_{14}^{ij} - \alpha_2 \alpha_3 C_{23}^{ij}) \quad (\text{siehe 2.44b})$$

bestimmt. Repräsentieren die α_1 bzw. α_2 z.B. eine Ankopplung der

Oszillatorimpulse an stochastische Magnetfelder, und die α_3 und α_4 die Wechselwirkung über elektrische Felder, kann man annehmen, daß der Beitrag der elektrischen Felder wesentlich stärker ist als der der Magnetfelder, so daß der Beitrag der Lagenkopplung über "c" sehr gering ist. Behandelt man Oszillatoren, die sich z.B. nur in ihren Eigenfrequenzen unterscheiden, verschwindet dieser Beitrag ohnehin, so daß er in den späteren Rechnungen vernachlässigt wird.

Verallgemeinert man den Begriff des Wärmebades, läßt sich das Modell auf alle Vorgänge anwenden, die ein Dissipationsverhalten in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit zeigen und sich mit Bewegungsgleichungen von der Art Gl.(2.51) beschreiben lassen. Als Beispiel sei hier die Kopplung von Stromschichten über rasch fluktuierende Magnetfelder in heißen Plasmen genannt.

Die Dämpfungskonstanten γ_a und γ_b sowie die Kopplungen K_{2a} und K_{2b} enthalten noch einen Term, der vom Quadrat der Eigenfrequenzen ω_a bzw. ω_b abhängig ist. Dies zeigt sich auch beim ungekoppelten Oszillator ($K_1=0$, $K_{2a}=0$, $K_{2b}=0$), man erhält aus Gl.(2.45) für die Dämpfung z.B. des Oszillators "a":

$$\gamma_a = \frac{m}{4} \beta \sum_{ij} (\alpha_3^2 C_{33}^{ij} + \omega_a^2 \alpha_4^2 C_{44}^{ij}) = c_1 + c_2 \cdot \omega_a^2 \quad (2.57)$$

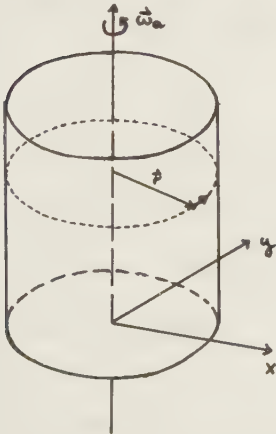


Bild 4

Diese Abhängigkeit der Dämpfungskonstanten von der Eigenfrequenz läßt sich am Beispiel eines mit Öl gefüllten Lagers einer Zentrifuge experimentell verifizieren [43]. Betrachtet man einen Massenpunkt an der Oberfläche des Lagerzapfens dieser Zentrifuge, der wie in Bild 4 als Zylinder dargestellt werden soll, wird seine Bewegung durch die Gleichung

$$m \ddot{r}_a + m \omega_a^2 \vec{r}_a = 0 \quad (2.58a)$$

bestimmt, was bei Projektion auf die x-Achse auf die Beziehung

$$m \ddot{x}_a(t) + m \omega_a^2 x_a(t) = 0 \quad (2.58b)$$

führt. Der Massenpunkt verhält sich also auf der x-Achse wie ein eindimensionaler harmonischer Oszillator. Mit Einführung einer Dämpfung über die Hamiltonfunktion (2.3) bekommt man für einen Oszillator die Bewegungsgleichung:

$$\ddot{x}_a(t) + 2\gamma_a \dot{x}_a(t) + \omega_a^2 x_a(t) = f_1(t)$$

mit $\bar{x}_a$ aus (2.57). Für einen Zylinder vom Radius r ergibt sich dann, wenn man den Mittelwert über alle Massenpunkte nimmt, folgende Bewegungsgleichung:

$$m \langle \ddot{x}_a(t) \rangle + D \langle \dot{x}_a(t) \rangle + m \omega_a^2 \langle x_a(t) \rangle = 0 \quad (2.58c)$$

mit $D = 2 m \bar{\gamma}_a = \tilde{c}_1 + \tilde{c}_2 \omega_a^2$

Damit läßt sich nun die Dämpfung D eines mit Öl gefüllten Lagers einer Zentrifuge beschreiben, an dem D in Abhängigkeit von der Drehfrequenz ω_a gemessen wurde [43]. Bei konstanter Temperatur und verschiedenen Radien wurden Messungen gemacht, bei denen eine Abhängigkeit von der Umfangsgeschwindigkeit nicht auftrat. Sie ergaben folgende Kurve:

$$D = 175 - 1.025 \cdot 10^{-5} \omega_a^2 \quad [D] = \text{N sec/m}$$

für den Bereich $0 \leq \omega_a \leq 600 \text{ sec}^{-1}$. Bild 5 zeigt diese quadratische Abhängigkeit von D von der Kreisfrequenz. Die Dämpfung nimmt hier mit wachsender Frequenz ab, bleibt aber insgesamt positiv. Dieses Verhalten ist durchaus im Modell enthalten, da die C_{44}^{ij} in (2.57) auch negativ werden können. Oberhalb von $\omega_a = 600 \text{ sec}^{-1}$ kann Resonanzkopplung zwischen Ölbad und Rotor stattfinden, es treten also nichtlineare Effekte auf, die im Modell nicht enthalten sind.

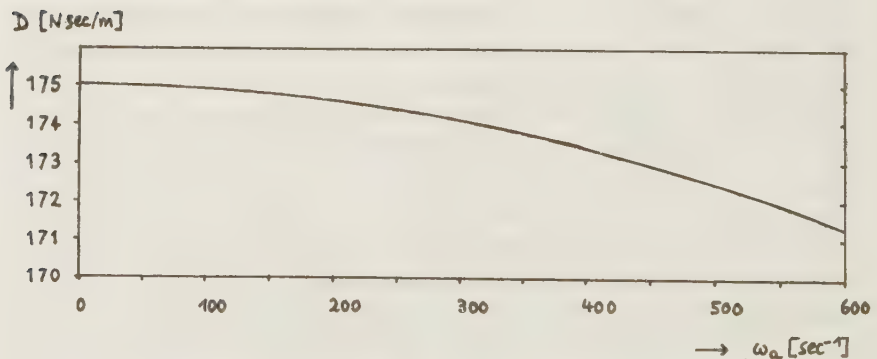


Bild 5: Dämpfung in Abhängigkeit von der Eigenfrequenz [43]

II.7 Dichtefunktion und Responsefunktionen für ein System paarweise gekoppelter gedämpfter Oszillatoren.

Nimmt man an, daß "a" und "b" nicht nur zwei einzelne Oszillatoren beschreiben, sondern Schwingungsmoden zweier statistischer Gesamtheiten "a" und "b" darstellen, repräsentiert die Hamiltonfunktion H in Gl. (2.49) ein System von sehr vielen paarweise gekoppelten Oszillatoren im Wärmebad. Dies führt im Modell wieder zu den Bewegungsgleichungen (2.51a,b) für die

entsprechenden Moden. Trägt nun z.B. die Masse "a" die Ladung q , und läßt man ein äußeres Feld $E(t)$ ab einem Zeitpunkt $t_1 > t_0$ auf das System wirken, wie es im mechanischen Modell in Bild 6 skizziert ist, erhält man mit der äußeren Kraft

$$F(t) = q \cdot E(t)$$

die Hamiltonfunktion:

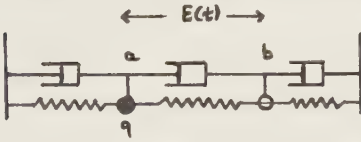


Bild 6: Gekoppelte Oszillatoren
mit äußerer Kraft

$$\begin{aligned} H_S &= H_{osc} + V_{aB} + V_{bB} + H_B(\vec{r}, \vec{p}) + H_{ex}(t) \\ &= H_S^F + H_{ex}(t) \end{aligned} \quad (2.59)$$

mit den Bezeichnungen:

$$\begin{aligned} H_{osc} &= \frac{p_a^2}{2m} + \frac{p_b^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_a^2 x_a^2 + \frac{1}{2} m \omega_b^2 x_b^2 + \frac{1}{2} m k_1^2 (x_a - x_b)^2 \\ V_{aB} &= \alpha_1 p_a(t) \sum_i g_{1i}(t) + m \alpha_3 x_a(t) \sum_i g_{3i}(t) \\ V_{bB} &= \alpha_2 p_b(t) \sum_i g_{2i}(t) + m \alpha_4 x_b(t) \sum_i g_{4i}(t) \\ H_{ex}(t) &= - F(t) x_a(t) \Theta(t - t_1) \end{aligned} \quad (2.60)$$

wobei noch $H_B(\vec{x}, \vec{p})$ die Bad-Hamiltonfunktion ist und die $g_{ji}(t)$ wieder die Bedeutung der entsprechenden Größen in Gl.(2.7) haben. Mit der oben ausgeführten Näherungsmethode erhält man wieder die Bewegungsgleichungen

$$\ddot{x}_a + 2\hat{g}_a \dot{x}_a + \hat{\omega}_a^2 x_a = -k_{1a}^2 (x_a - x_b) - 2k_{2a} (\dot{x}_a - \dot{x}_b) + f_1(t) + \hat{f}(t) \quad (2.61a)$$

$$\ddot{x}_b + 2\hat{g}_b \dot{x}_b + \hat{\omega}_b^2 x_b = -k_{1b}^2 (x_b - x_a) - 2k_{2b} (\dot{x}_b - \dot{x}_a) + f_2(t) \quad (2.61b)$$

mit $\hat{g}_a, \hat{g}_b, K_{2a}, K_{2b}, \hat{\omega}_a^2$ und $\hat{\omega}_b^2$ aus Gl.(2.45), K_{1a} und K_{1b} aus Gl.(2.51), den durch die Masse geteilten stochastischen Kräften $f_1(t)$ und $f_2(t)$ aus Gl.(2.24) und $\hat{f}(t) = F(t)/m$ als Antrieb durch das äußere Feld.

Um nun die Lösungen der Bewegungsgleichungen zu berechnen, ist es zweckmäßig, sich auf die Berechnung der Mittelwerte von x_a und x_b zu beschränken, die ja allein physikalisch meßbare Größen darstellen. Dabei ist die Frage von Interesse, wie sich ein System, das sich mit dem Bad im Gleichgewicht befindet, auf eine äußere Störung reagiert. Zu berechnen sind also nur die Mittelwerte der Abweichungen vom Gleichgewichtswert, also die Größen

$$\delta \langle x_{a/b}(t) \rangle = \langle x_{a/b}(t) \rangle - \langle x_{a/b}^F(t) \rangle \quad (2.62)$$

wobei "F" das System ohne äußere Kraft bezeichnet. Da die äußere Störung $H_{ex}(t)$ schwach sein soll im Vergleich zur Gesamthamiltonfunktion H_S , kann man die "Linear-Response"-Theorie [39,40] auf das Gleichungssystem (2.61) anwenden. Dazu ist es notwendig, die Verteilungsfunktion $g_S(t)$ des Systems zu bestimmen und sich mit den Eigenschaften der Responsefunktion vertraut zu machen.

Die Verteilungsfunktion $g_S(t)$ genügt der Bewegungsgleichung [38,40]

$$\frac{\partial}{\partial t} g_S(t) = -i L_S(t) g_S(t) \quad (2.63a)$$

mit dem Liouville-Operator L_S

$$\begin{aligned} L_S &= L_S^F + L_S^{ex}(t) \\ &= -i \{ \cdot, H_S^F \} - i \{ \cdot, H_{ex}(t) \} \end{aligned} \quad (2.63b)$$

Da für $t < t_1$ $H_{ex}(t)$ verschwindet, kann man als Anfangsbedingung zu (2.63a) die kanonische Verteilung [37]

$$g_S(t_1) = g_S^F = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_S^F} \quad (2.64a)$$

mit der Zustandssumme

$$Z = \int dx_a dx_b dp_a dp_b d\vec{x}; d\vec{p}; e^{-\beta H_S^F}, \quad \beta = 1/kT \quad (2.64b)$$

benutzen. Diese Verteilungsfunktion g_S^F ist nicht mehr explizit von der

Zeit abhängig, d.h.:

$$\{g_s^F, H_s^F\} = 0$$

Für Zeiten $t < t_0$ faktorisiert die Dichtefunktion in ihren Oszillator- und Badanteil:

$$g_s^F(t < t_0) = g_0 = g_{osc}^0 \cdot g_B^0 = \frac{1}{z_{osc}^0} e^{-\beta H_{osc}^0} \cdot \frac{1}{z_B^0} e^{-\beta H_B^0} \quad (2.65)$$

Mittelwerte von physikalischen Observablen $B(x_a, p_a, x_b, p_b)$, die nur von den kanonischen Oszillatorvariablen abhängen, werden durch Phasenraumintegration berechnet:

$$\langle B \rangle_{H_s^F} = \int d\tau_{osc} d\tau_B g_s^F B$$

$$d\tau_{osc} = dx_a dx_b dp_a dp_b \quad d\tau_B = d\vec{r}; d\vec{p}; \quad (2.66)$$

was im wechselwirkungsfreien Fall ($t < t_0$) ergibt:

$$\langle B \rangle_{H_s^F} = \int d\tau_{osc}^0 g_{osc}^0 B(x_a^0, x_b^0, p_a^0, p_b^0) = \langle B_0 \rangle_{H_{osc}^0}$$

Durch das adiabatische Einschalten der Wechselwirkung zwischen Bad und Oszillatoren läßt sich die Dichtefunktion nicht mehr faktorisieren. Es läßt sich aber zeigen, daß für Potenzen von X ($X = x_a, x_b, p_a, p_b$) gilt (siehe Anhang A3):

$$\langle X^k \rangle_{H_s^F} = \langle X_0^k \rangle_{H_{osc}^0} (1 + O(\alpha^2)) \quad (2.67)$$

Für ungerade Potenzen von X verschwinden also die Mittelwerte, für gerade Potenzen erhält man einen Korrekturfaktor, der sich sehr wenig von Eins unterscheidet, so daß man nach Entwicklung in eine Taylorreihe setzen kann

$$\langle B \rangle_{H_s^F} \approx \langle B_0 \rangle_{H_{osc}^0} \quad (2.68a)$$

Insbesondere gilt für die Energie eines Oszillators

$$\langle E_{a|b} \rangle_{H_s^F} = \langle T_{a|b} \rangle_{H_s^F} + \langle V_{a|b} \rangle_{H_s^F} = \langle T_{a|b}^0 \rangle_{H_{osc}^0} + \langle V_{a|b}^0 \rangle_{H_{osc}^0} = kT \quad (2.68b)$$

Für die Mittelwertbildung von Oszillatorgrößen ist also die Phasenraumintegration über die Badvariablen praktisch nicht von Bedeutung. Für $t > t_0$

schaltet sich die äußere Kraft ein, und man erhält als Lösung von (2.63a):

$$g_s(t) = e^{-i \int_{t_1}^t dt' L_s^{\text{ex}}(t')} \cdot e^{-i L_s^F(t-t')} g_s^F \quad (2.69a)$$

wenn man die Anfangsbedingung (2.64a) berücksichtigt. Dieser Darstellung entspricht in der Quantenmechanik die Beschreibung der Zeitentwicklung im Wechselwirkungsbild. Da der Störanteil von H_s klein ist im Vergleich zum ungestörten Anteil H_s^F , kann man in (2.69a) den Störterm in eine Reihe entwickeln und nach dem ersten Glied abberechnen. Wegen $i \cdot L_s^F g_s^F = 0$ erhält man dann:

$$\begin{aligned} g_s(t) &\approx g_s^F - i \int_{t_1}^t dt' e^{-i L_s^F(t-t')} L_s^{\text{ex}}(t') g_s^F \\ &= g_s^F - \int_{t_1}^t dt' e^{-i L_s^F(t-t')} \{g_s^F, H_{\text{ex}}(t')\} \\ g_s(t) &= g_s^F + \int_{t_1}^t dt' F(t') e^{-i L_s^F(t-t')} \{g_s^F, x_a(t')\} \end{aligned} \quad (2.69b)$$

Die Antwort des Systems auf die äußere Kraft bekommt man nun durch die Änderung des Mittelwertes von Observablen $B(t)$ im Oszillatorsystem, wobei $B(t)$ von der Zeit nur über die kanonischen Variablen abhängen soll:

$$\begin{aligned} \langle B(t) \rangle_{H_s} &= \langle B(t) \rangle_{H_s^F} - \int_{t_1}^t dt' F(t') \int d\tau g_s^F \{B(t), x_a(t')\} \\ &= \langle B(t) \rangle_{H_s^F} - \int_{t_1}^t dt' F(t') \langle \{B(t), x_a(t')\} \rangle_{H_s^F} \end{aligned} \quad (2.70)$$

Für die weitere Rechnung sind vor allem die Änderungen der Ortsvariablen $x_a(t)$ und $x_b(t)$ von Interesse. Wegen $\langle x_{a/b}(t) \rangle_{H_s^F} = 0$

kann man als "absorptive Responsefunktion" definieren:

$$\chi''_{\beta\gamma}(t-t') = \frac{i}{2} \langle \{x_\beta(t), x_\gamma(t')\} \rangle_{H_s^F} \quad (\beta, \gamma = a, b) \quad (2.71)$$

wenn man sowohl den Beginn der äußeren Störung t_1 als auch die Anfangszeit t_0 der Badwechselwirkung nach $t = -\infty$ verschiebt. Damit erhält man für die Mittelwerte der Ortsvariablen:

$$\langle x_a(t) \rangle_{H_S} = 2i \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') \chi_{aa}''(t-t') \Theta(t-t') \quad (2.72a)$$

$$\langle x_b(t) \rangle_{H_S} = 2i \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') \chi_{ba}''(t-t') \Theta(t-t') \quad (2.72b)$$

Definiert man als Responsefunktion

$$\chi_{\beta\alpha}(t-t') = 2i \chi_{\beta\alpha}''(t-t') \Theta(t-t') \quad (2.73)$$

erhält man:

$$\langle x_a(t) \rangle_{H_S} = \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') \chi_{aa}(t-t') \quad (2.74a)$$

$$\langle x_b(t) \rangle_{H_S} = \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') \chi_{ba}(t-t') \quad (2.74b)$$

Mit der Responsefunktion (2.73) hat man nun eine Funktion gefunden, die die Mittelwerte der Abweichungen $\langle x_a \rangle$ und $\langle x_b \rangle$ linear mit der äußeren Kraft verknüpft. Wie später noch gezeigt wird, ist $\chi_{\beta\alpha}(t-t')$ die Greensfunktion zu den Differentialgleichungen (2.61). Man kann also die partikulären Lösungen von (2.61) aus der Berechnung von $\chi_{\beta\alpha}(t-t')$ erhalten.

Im folgenden sollen noch kurz die Eigenschaften der Responsefunktion erwähnt werden, ausführliche Betrachtungen finden sich in der Literatur [38,38,40] für nicht gekoppelte Systeme, die nun übernommen werden können, da der Formalismus auch auf gekoppelte Systeme übertragen werden kann.

Wegen der Zeittranslationsinvarianz und der Eigenschaft der Poisson-Klammern gilt:

$$\chi_{\beta\alpha}''(t-t') = -\chi_{\alpha\beta}''(t'-t) \quad (2.75a)$$

Da $x_{\alpha}(t)$ in der klassischen Theorie eine rein reelle Größe ist, wird $\chi_{\beta\alpha}''(t-t')$ eine rein imaginäre Größe:

$$\chi_{\beta\alpha}''(t-t')^* = \chi_{\alpha\beta}''(t'-t) \quad (2.75b)$$

Zur absorptiven Responsefunktion läßt sich die Fouriertransformierte $\chi''_{\beta\gamma}(\omega)$ formulieren:

$$\chi''_{\beta\gamma}(t-t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} \chi''_{\beta\gamma}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} \quad (2.75c)$$

mit den Symmetrierelationen:

$$\chi''_{\beta\gamma}(\omega) = -\chi''_{\gamma\beta}(-\omega) \quad , \quad \chi''_{\beta\gamma}(\omega)^* = \chi''_{\gamma\beta}(\omega) \quad (2.75d)$$

Definiert man als komplexe Responsefunktion $\chi_{\beta\gamma}(\omega)$ das Integral in der komplexen ω -Ebene:

$$\chi_{\beta\gamma}(\omega) = \lim_{z \rightarrow +\omega} \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\chi''_{\beta\gamma}(\omega')}{\omega' - z} \quad (2.76a)$$

mit

$$\chi_{\beta\gamma}(\omega) = \chi'_{\beta\gamma}(\omega) + i \chi''_{\beta\gamma}(\omega) \quad (2.76b)$$

erhält man die Dispersionsrelationen

$$\chi'_{\beta\gamma}(\omega) = P \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\chi''_{\beta\gamma}(\omega')}{\omega' - \omega} \quad , \quad \chi''_{\beta\gamma}(\omega) = -P \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\chi'_{\beta\gamma}(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (2.76c)$$

Die Responsefunktion $\chi_{\beta\gamma}(t-t')$ ist dann die Fouriertransformierte der komplexen Responsefunktion $\chi_{\beta\gamma}(\omega)$.

Der Übergang von der klassischen Theorie zur Quantenmechanik läßt sich vollziehen, indem man die Poisson-Klammer durch den Kommutator

$$\{A, B\} \xrightarrow[\text{klassisch}]{\text{q.m.}} \frac{1}{i\hbar} [A, B]$$

und die Phasenraumintegration zur Mittelwertbildung durch die Spurbildung mit der Dichtematrix ersetzt:

$$\int d\tau \varrho^F \dots \rightleftharpoons \text{Sp}(\varrho^F \dots)$$

Damit läßt sich die quantenmechanische absorptive Responsefunktion definieren:

$$\chi''_{\beta\gamma}(t-t') = \frac{1}{2\hbar} \langle [x_{\beta}(t), x_{\gamma}(t')] \rangle \quad (2.77)$$

was wiederum zur Responsefunktion entsprechend (2.73) führt. Die Symmetriebeziehungen und Dispersionsrelationen bleiben erhalten.

Zum Schluß des Abschnitts soll noch der Zusammenhang zwischen Responsefunktion und der vom System absorbierten Energie gezeigt werden. Betrachtet man den Mittelwert der Energie $E(t) = \langle H_S(t) \rangle_{H_S}$, erhält man für die zeitliche Änderung der Energie

$$N(t) = \frac{dE(t)}{dt} = \langle \{H_S, H_S\} \rangle_{H_S} + \frac{\partial}{\partial t} \langle H_S \rangle_{H_S} = - \langle x_a(t) \rangle_{H_S} \cdot \dot{F}(t) \quad (2.78a)$$

Die vom System aufgenommene Energie ist dann

$$\Delta E = \int_{-T}^T dt N(t) = \int_{-T}^T dt F(t) \frac{\partial}{\partial t} \langle x_a(t) \rangle_{H_S} \quad (2.78b)$$

wenn T so groß gewählt ist, daß $F(T) = F(-T) = 0$ gilt.

Beschreibt man in (2.78b) die zeitabhängigen Größen durch ihre Fouriertransformierten, benutzt für $\langle x_a(t) \rangle_{H_S}$ das Faltungstheorem

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle x_a(t) \rangle_{H_S} = \int \frac{d\omega}{2\pi} F(\omega) (-i\omega) \chi_{aa}(\omega) e^{-i\omega t} \quad (2.79a)$$

und berücksichtigt das Wiener-Khinchin-Theorem:

$$\int dt A(t)^* B(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} A(\omega)^* B(\omega) \quad (2.79b)$$

erhält man für (2.78b):

$$\Delta E = -i \int \frac{d\omega}{2\pi} F(\omega)^* F(\omega) \omega \chi_{aa}(\omega) \quad (2.80)$$

wobei die äußere Kraft $F(t)$ rein reell ist, somit $F(\omega)^* = F(-\omega)$ gilt, und $\chi_{aa}(\omega)$ durch Gl.(2.76b) gegeben ist. Da der Realteil von $\chi_{aa}(\omega)$ eine gerade Funktion in ω ist, erhält man

$$\Delta E = \int \frac{d\omega}{2\pi} F(\omega)^* F(\omega) \omega \chi''_{aa}(\omega) \quad (2.81)$$

Diese Energie wird auf die Mode "a" durch die äußere Kraft übertragen. Dadurch wird sie aus der Gleichgewichtslage gebracht. Lagekopplung und die Kopplung über das Wärmebad bewirken dann eine Auslenkung der Oszillatoren "b" aus ihrer Gleichgewichtslage. Gleichzeitig verursacht die Kopplung an das Bad eine Dissipation der Energie, wobei beide Moden "a" und "b" beitragen. E ist also auch ein Maß für die dissipierte Energie.

Für eine monochromatische äußere Kraft

$$F(t) = \frac{1}{2} m (a e^{i\bar{\omega}t} + a^* e^{-i\bar{\omega}t})$$

erhält man für die über eine Periode gemittelte Leistung nach (2.78a)

$$\bar{N} = \frac{1}{2} m^2 \bar{\omega}^2 |a|^2 \frac{\chi''_{aa}(\bar{\omega})}{\bar{\omega}} \quad (2.82)$$

Die Leistung ist also das Quadrat des Betrages der pro Periode wirkenden Kraft, gewichtet mit der "Intensität"

$$\hat{I}_{aa}(\omega) = \frac{\chi''_{aa}(\omega)}{\omega} \quad (2.83)$$

die bestimmt, mit welcher Stärke die Frequenz ω beiträgt. Die Berechnung von

$$I_{aa}(\omega) = \frac{\hat{I}_{aa}(\omega)}{\int d\omega \hat{I}_{aa}(\omega)} \quad (2.84a)$$

oder von

$$I_{aa}(\omega) = \frac{\hat{I}_{aa}(\omega)}{\hat{I}_{aa}^{max}} \quad (2.84b)$$

einer entweder auf Eins oder auf das Maximum normierten Intensität, die künftig "Absorptionsprofil" genannt werden soll, einer Größe also, die unabhängig ist von der Form der äußeren Kraft, gestattet es, über die Fouriertransformation das zeitliche Verhalten des Oszillatorsystems zu beschreiben.

II.8 Zusammenfassung des Kapitels

Mit der Hamiltonfunktion:

$$H_F = H_{osc} + H_B(\vec{x}, \vec{p}) + V_{aB}(x_a, p_a, \vec{x}, \vec{p}) + V_{bB}(x_b, p_b, \vec{x}, \vec{p})$$

$$H_{osc} = \frac{p_a^2}{2m} + \frac{p_b^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_a^2 x_a^2 + \frac{1}{2}m\omega_b^2 x_b^2 + \frac{1}{2}mK_A(x_a - x_b)^2 \quad (2.85)$$

$$V_{aB}(x_a, p_a, \vec{x}, \vec{p}) = \alpha_4 p_a(t) \sum_i g_{4i}(t) + m\alpha_3 x_a(t) \sum_i g_{3i}(t)$$

$$V_{bB}(x_b, p_b, \vec{x}, \vec{p}) = \alpha_2 p_b(t) \sum_i g_{2i}(t) + m\alpha_4 x_b(t) \sum_i g_{4i}(t)$$

läßt sich ein System von paarweise über ihre Lage gekoppelten Oszillatoren beschreiben, die mit einem Wärmebad wechselwirken. Durch die Annahme, daß sich die Oszillatoren wie Brown'sche Teilchen verhalten, lassen sich die Mittelwerte von gestörten Badgrößen in linearer Näherung in den Oszillatorkoordinaten beschreiben, was zu den Bewegungsgleichungen für die Oszillatormoden:

$$\ddot{x}_a(t) + 2\hat{\gamma}_a \dot{x}_a(t) + \hat{\omega}_a^2 x_a(t) = -K_{1a}^2(x_a(t) - x_b(t)) - 2K_{2a}(\dot{x}_a(t) - \dot{x}_b(t)) + f_1(t) \quad (2.86)$$

$$\ddot{x}_b(t) + 2\hat{\gamma}_b \dot{x}_b(t) + \hat{\omega}_b^2 x_b(t) = -K_{1b}^2(x_b(t) - x_a(t)) - 2K_{2b}(\dot{x}_b(t) - \dot{x}_a(t)) + f_2(t)$$

führt. Diese Gleichungen beschreiben nun ein System zweier gedämpfter harmonischer Oszillatoren, die über ihre Lage koppeln. Zusätzlich entsteht noch eine Kopplung über ihre Geschwindigkeiten durch die Wechselwirkung mit dem Bad. Als mechanisches Modell kann man dazu Bild 3 betrachten. Entfernen sich die Gleichgewichtslagen der Oszillatoren voneinander, verschwindet die Geschwindigkeitskopplung, die Gln.(2.86) werden dann zu Langevin-Gleichungen zweier Teilchen in ihren Potentialfeldern. $\hat{\gamma}_a, \hat{\gamma}_b, K_{2a}$ und K_{2b} zeigen noch eine Abhängigkeit von den Eigenfrequenzen der Oszillatoren.

Die Hamiltonfunktion H_F ist die Gesamtenergie des Systems Oszillatoren-Bad, H_F ist daher konservativ. Man kann so mit H_F die Zeitentwicklung des Systems und auch seiner Untersysteme beschreiben, was zur Lösung der Schwingungsgleichungen (2.86) benutzt werden wird. Dabei lassen sich die Methoden der "Linear-Response"-Theorie anwenden.

III.) Responsefunktionen, Eigenwerte und Absorptionsprofil für das gekoppelte System

Ausgehend von den im Kapitel II erhaltenen Beziehungen sollen nun die frequenzabhängigen Responsefunktionen für das gekoppelte System berechnet werden. In Abhängigkeit von der Kopplung erhält man nun geänderte Eigenfrequenzen und Dämpfungskonstanten, wobei eine starke Änderung der Dämpfungen vor allem durch den Einfluß der Geschwindigkeitskopplung verursacht wird, was im Absorptionsprofil zu Dämpfungseinbrüchen und langlebigen Zuständen führt. Das Absorptionsprofil läßt sich in zwei Anteile zerlegen, die den geänderten Schwingungsmoden zugeordnet werden können. Diese Zerlegung läßt sich auch für die frequenzabhängigen Responsefunktionen eines Systems durchführen, in dem beide Moden durch eine äußere Kraft angetrieben werden. Mit diesen Responsefunktionen erhält man über die Fouriertransformation die zeitabhängigen Responsefunktionen, mit deren Hilfe die zeitabhängigen Lösungen des Systems formuliert werden können.

III.1 Berechnung der frequenzabhängigen linearen Response und der Absorptionsprofile aus den Bewegungsgleichungen.

Mit den Betrachtungen von Kapitel II, Abschnitt II.7 ist es nun möglich, die Responsefunktionen (2.76) und das Absorptionsprofil (2.84b) explizit zu berechnen. Mit den Bezeichnungen

$$P_a \left(\frac{d}{dt} \right) = \frac{d^2}{dt^2} + 2 \gamma_a \frac{d}{dt} + \hat{\omega}_a^2 + K_{1a}^2 \quad (3.1a)$$

$$P_b \left(\frac{d}{dt} \right) = \frac{d^2}{dt^2} + 2 \gamma_b \frac{d}{dt} + \hat{\omega}_b^2 + K_{1b}^2 \quad (3.1b)$$

$$P_{ab} \left(\frac{d}{dt} \right) = P_a \left(\frac{d}{dt} \right) P_b \left(\frac{d}{dt} \right) - (2 K_{2a} \frac{d}{dt} + K_{1a}^2) (2 K_{2b} \frac{d}{dt} + K_{1b}^2) \quad (3.1c)$$

erhält man aus den Bewegungsgleichungen (2.61) für die Mittelwerte der Ortsvariablen:

$$P_a \left(\frac{d}{dt} \right) \langle x_a(t) \rangle_{H_S} = (2 K_{2a} \frac{d}{dt} + K_{1a}^2) \langle x_b(t) \rangle_{H_S} + \hat{f}(t) \quad (3.2a)$$

$$P_b \left(\frac{d}{dt} \right) \langle x_b(t) \rangle_{H_S} = (2 K_{2b} \frac{d}{dt} + K_{1b}^2) \langle x_a(t) \rangle_{H_S} \quad (3.2b)$$

Setzt man $\langle x_a(t) \rangle_{H_5}$ bzw. $\langle x_b(t) \rangle_{H_5}$ aus Gl.(2.74) ein, erhält man:

$$\int dt' F(t') [P_a(\frac{d}{dt'}) \chi_{aa}(t-t') - (2K_{2a} \frac{d}{dt'} + K_{1a}^2) \chi_{ba}(t-t') - \frac{1}{m} \delta(t-t')] = 0 \quad (3.3a)$$

$$\int dt' F(t') [P_b(\frac{d}{dt'}) \chi_{ba}(t-t') - (2K_{2b} \frac{d}{dt'} + K_{1b}^2) \chi_{aa}(t-t')] = 0 \quad (3.3b)$$

Läßt man in (3.3) die Kopplungen K_{2a} , K_{2b} , K_{1a} und K_{1b} gegen Null gehen, wird

$$P_a(\frac{d}{dt'}) \chi_{aa}(t-t') = \frac{1}{m} \delta(t-t') \quad , \quad P_b(\frac{d}{dt'}) \chi_{ba}(t-t') = 0 \quad (3.4)$$

$\chi_{aa}(t-t')$ ist die Greensfunktion der Bewegungsgleichungen, die das Verhalten der Oszillatoren im Nichtgleichgewicht beschreibt, wobei nun $\chi_{ba}(t-t') = 0$ ist, da die Mode "b" nicht von außen angeregt wird und daher in Ruhe ist. Für nichtverschwindende Kopplung wird $\chi_{ba}(t-t')$ ungleich Null, zwischen beiden Greensfunktionen tritt eine Mischung ein. Geht man in Gl.(3.3) zur Fouriertransformierten über und berücksichtigt, daß jede Zeitableitung $\frac{d}{dt'} \chi_{b/a}(t-t')$ einen Beitrag $(-i\omega)$ ergibt, erhält man unter Berücksichtigung des Faltungstheorems:

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} F(\omega) [P_a(-i\omega) \chi_{aa}(\omega) + (2i\omega K_{2a} - K_{1a}^2) \chi_{ba}(\omega) - \frac{1}{m}] = 0 \quad (3.5a)$$

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} F(\omega) [P_b(-i\omega) \chi_{ba}(\omega) + (2i\omega K_{2b} - K_{1b}^2) \chi_{aa}(\omega)] = 0 \quad (3.5b)$$

was bedeutet, daß jeweils die Klammerausdrücke in den Integranden verschwinden müssen. Dies ergibt für die Responsefunktionen:

$$\chi_{aa}(\omega) = \frac{P_b(-i\omega)}{m P_{ab}(-i\omega)} \quad \chi_{ba}(\omega) = \frac{K_{1b}^2 - 2i\omega K_{2b}}{m P_{ab}(-i\omega)} \quad (3.6)$$

mit $P_a(-i\omega)$, $P_b(-i\omega)$ und $P_{ab}(-i\omega)$ aus Gl.(3.1).

Zur Berechnung des Absorptionsprofils ist es zweckmäßig, zuerst die Nullstellen von $P_{ab}(-i\omega)$ zu suchen und eine Partialbruchzerlegung von $\chi_{b/a}(\omega)$ durchzuführen. Wie in Anhang A4 ausführlich dargestellt, läßt sich bei den vorgegebenen Größenordnungen der Eingangsparameter das Verhalten des Systems im wesentlichen durch zwei Kopplungsgrößen:

$$K_L^4 = (K_1^2 + \frac{1}{2}(K_a^2 + K_b^2))^2 - \frac{1}{4}(K_a^2 - K_b^2)^2 \quad , \quad K_V^2 = K_{2a} K_{2b} (K_a, K_b \text{ aus 2.45}) \quad (3.7a)$$

bestimmen, so daß in der weiteren Rechnung die Zahl der Kopplungsparameter von vier auf zwei reduziert werden kann. Mit den Substitutionen:

$$\Omega_S = \frac{1}{2}(\omega_a^2 + \omega_b^2) + K_L^2 \quad , \quad \Omega_d = \frac{1}{2}(\omega_a^2 - \omega_b^2) \quad , \quad \gamma_S = \frac{1}{2}(\gamma_a + \gamma_b) \quad , \quad \gamma_d = \frac{1}{2}(\gamma_a - \gamma_b) \quad (3.7b)$$

erhält man als Nullstellen von $P_{ab}(-i\omega)$:

$$\hat{\omega}_{1/2} = \mp \sqrt{\omega_1^2 - \gamma_1^2} + i\gamma_1, \quad \hat{\omega}_{3/4} = \mp \sqrt{\omega_2^2 - \gamma_2^2} + i\gamma_2 \quad (3.8a)$$

mit

$$\gamma_{1/2} = \gamma_5 \pm \Gamma, \quad \Gamma = \operatorname{sgn} \gamma_d \sqrt{\frac{u}{2} + \gamma_d^2 + \kappa_v^2} \quad (3.8b)$$

$$\omega_{1/2}^2 = \Omega_5 + u \pm \Delta, \quad \Delta = \operatorname{sgn} \Delta \sqrt{u^2 + 2u\Omega_5 + \Omega_d^2 + \kappa_L^4} \quad (3.8c)$$

$$\operatorname{sgn} \Delta = \operatorname{sgn} \gamma_d \cdot \operatorname{sgn} (\gamma_5 u + \kappa_L^2 \kappa_v + \Omega_d \gamma_d)$$

U ist i.a. ein kleiner Korrekturfaktor, der eine Nullstelle des Polynoms

$$\begin{aligned} HX = & u^3 + 2u^2(\Omega_5 - \gamma_5^2 + \gamma_d^2 + \kappa_v^2) + u(\Omega_d^2 - 4\gamma_5 \gamma_d \Omega_d + 4\Omega_5(\gamma_d^2 + \kappa_v^2) - 4\gamma_5 \kappa_v \kappa_L^2 + \kappa_L^4) \\ & + 2(\Omega_d \kappa_v - \gamma_d \kappa_L^2)^2 \end{aligned} \quad (3.8d)$$

ist. Für U gilt dann:

$$-(\gamma_d^2 + \kappa_v^2) \leq \frac{1}{2}u \leq 0$$

$$-(\Omega_d^2 + \kappa_L^4) \leq u^2 + 2u\Omega_5 \leq 0$$

und wegen (3.8d) gilt:

$$\Delta \cdot \Gamma = \gamma_5 u + \kappa_v^2 \kappa_L^2 + \gamma_d \Omega_d \quad (3.8e)$$

Mit Hilfe der Lösungen (3.8a) läßt sich nun $\chi_{aa}(\omega)$ von Gl.(3.6) in Partialbrüche zerlegen und in Real- und Imaginärteil aufspalten. Dividiert man den Imaginärteil durch ω , erhält man wieder die Intensität (2.83). Nach einiger Rechnung, die mit Hilfe von REDUCE [41] durchgeführt wurde, ergab sich, daß sich die Intensität $\hat{I}_{aa}(\omega)$ aus zwei Teilen zusammensetzt, die jeweils den geänderten Moden 1 und 2 zugeordnet werden können:

$$\hat{I}_{aa}(\omega) = \hat{I}_1(\omega) + \hat{I}_2(\omega) \quad (3.9a)$$

mit

$$\hat{I}_1(\omega) = \frac{z_1}{mN} \frac{\omega^2 - \omega_1^2}{(\omega_1^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_1^2 \omega^2} + \frac{z_{r1} + z_{r2}}{mN} \frac{2\gamma_1}{(\omega_1^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_1^2 \omega^2} \quad (3.9b)$$

$$\hat{I}_2(\omega) = \frac{-z_2}{mN} \frac{\omega^2 - \omega_2^2}{(\omega_2^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_2^2 \omega^2} + \frac{z_{r1} - z_{r2}}{mN} \frac{2\gamma_2}{(\omega_2^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_2^2 \omega^2} \quad (3.9c)$$

und den Konstanten:

$$z_i = \gamma_d \Delta - \Gamma (u + \Omega_d)$$

$$z_{r1} = \frac{1}{2} u^2 + u (2\Omega_s - \Omega_d - 2\gamma_s (\gamma_s - \gamma_d)) + \frac{1}{2} (\Omega_d^2 + K_L^4) - 2\Omega_d (\gamma_s \gamma_d + K_V^2) + 2K_V K_L^2 (\gamma_d - \gamma_s) + 2\Omega_s (\gamma_d^2 + K_V^2) \quad (3.9d)$$

$$z_{r2} = 2\Gamma (u (\gamma_d - \gamma_s) - \gamma_s \Omega_d + \gamma_d \Omega_s) + \frac{1}{2} \Delta (u + \Omega_d)$$

$$N = \frac{d}{du} HX = 3u^2 + 4u (\Omega_s - \gamma_s^2 + \gamma_d^2 + K_V^2) + K_L^4 + \Omega_d^2 - 4\gamma_s \gamma_d \Omega_d - 4\gamma_s K_V K_L^2 + 4\Omega_s (\gamma_d^2 + K_V^2)$$

Die Koeffizienten z_i/N und $(z_{r1} \pm z_{r2})/N$, die die Größe der Anteile bestimmen, hängen von den Kopplungen K_L und K_V ab. Dabei läßt sich i.a. feststellen, daß

$$\frac{z_{r1} + z_{r2}}{N} \rightarrow 1, \quad \frac{z_{r1} - z_{r2}}{N} \rightarrow 0, \quad \frac{z_i}{N} \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad \frac{2\gamma_s}{\omega_a + \omega_b} \rightarrow 0$$

gilt. Das Verhalten der dimensionslosen Größen $\gamma_s z_i/N$ und $(z_{r1} \pm z_{r2})/N$ als Funktion der Frequenzmitte $\frac{1}{2}(\omega_a + \omega_b)$ ist in den Bildern 7a)-7d) für verschiedene Parameterwerte aufgetragen. Im dissipationsfreien Fall ($\gamma_s \rightarrow 0$) verschwinden auch γ_d , K_V , und damit u , so daß sich für

$$\frac{z_i}{N} = 0, \quad \frac{z_{r1} \pm z_{r2}}{N} = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\Omega_d^2 + K_L^4} \pm \Omega_d}{\sqrt{\Omega_d^2 + K_L^4}}$$

und für die Teilintensitäten (3.9b,c)

$$\hat{I}_{1/2}(\omega) = \frac{1}{2\omega_{1/2}^2} \frac{\sqrt{\Omega_d^2 + K_L^4} \pm \Omega_d}{\sqrt{\Omega_d^2 + K_L^4}} \delta(\omega^2 - \omega_{1/2}^2) \quad (3.10)$$

in Limes $\gamma_{1/2} \rightarrow 0$ ergibt. Man erhält somit die Intensitäten für zwei ungedämpfte Schwingungen, bei denen $\hat{I}_2(\omega) = 0$ für $K_L \rightarrow 0$ wird, womit sich die Intensität

$$\hat{I}_{aa}(\omega) = \frac{1}{\omega_a^2} \delta(\omega^2 - \omega_a^2)$$

ergibt. Insgesamt bekommt man so als Intensität zweier gekoppelter Moden im wesentlichen die Summe zweier Intensitäten, deren Frequenzabhängigkeiten durch das Absorptionsverhalten von gedämpften harmonischen Oszillatoren mit den Eigenfrequenzen ω_1 bzw. ω_2 und den Dämpfungen γ_1 bzw. γ_2 beschrieben werden.

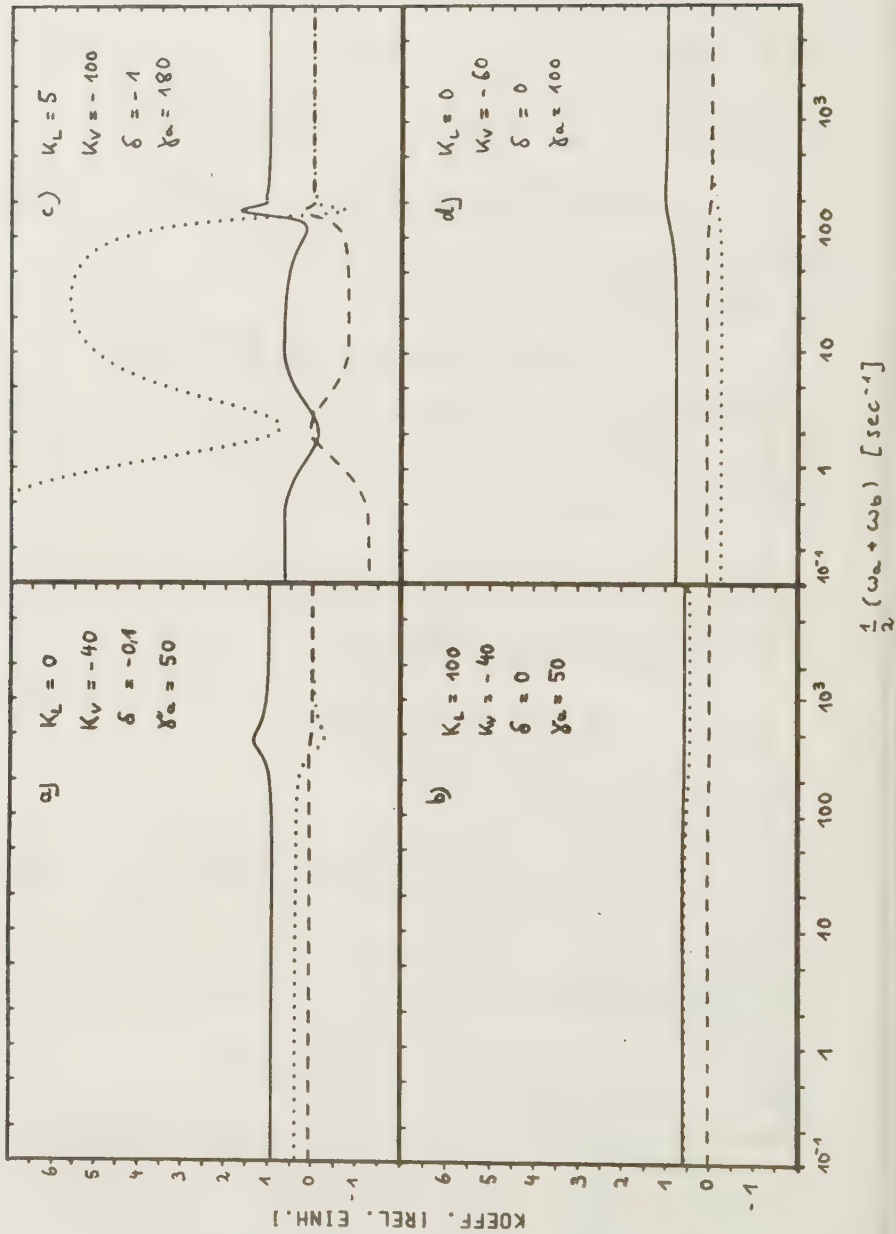


Bild 7: Koeffizienten zu Gl.(3.9d) für verschiedene K_L , K_V , γ_a ,
 $\delta = (\omega_a - \omega_b) / (\omega_a + \omega_b)$ in Abhängigkeit vom Frequenzmittel $(\omega_a + \omega_b) / 2$
 $(z_{r1} + z_{r2}) / N$ —, $(z_{r1} - z_{r2}) / N$, z_i / N ----
 $\gamma_b = 60 \text{ sec}^{-1}$ für alle Bilder

Für verschwindende Kopplungen $K_L=0$ und $K_V=0$ wird

$$Z_1 = 0 \quad Z_{r1} = Z_{r2} = \frac{1}{2} N \quad \gamma_1 = \gamma_2 \quad \omega_1 = \omega_2$$

so daß man die bekannte Intensität [39]

$$\hat{I}_{aa}^0(\omega) = \frac{1}{m} \frac{2\gamma_a}{(\omega_a^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_a^2 \omega^2}$$

für einen gedämpften Oszillator erhält. Dies läßt sich dazu benutzen, um analog zu Gl.(2.84b) das Absorptionsprofil zu definieren:

$$I_{aa}(\omega) = \frac{\hat{I}_{aa}(\omega)}{\hat{I}_{aa}^{\text{max}}(\omega)} = \frac{2m\gamma_a(\omega_a^2 - \gamma_a^2)}{\hat{I}_{aa}^{\text{max}}(\omega)} \hat{I}_{aa}(\omega) \quad (3.11)$$

so daß man für die über die äußere Kraft aufgenommene Energie nach Gl.(2.81)

$$\Delta E = \frac{1}{2m\gamma_a(\omega_a^2 - \gamma_a^2)} \int d\omega F(\omega)^* F(\omega) \hat{I}_{aa}(\omega) \quad (3.12)$$

und für eine periodische Kraft nach Gl.(2.82) die mittlere Leistung

$$\bar{N} = \frac{1}{4} m \frac{\bar{\omega}^2 |a|^2}{\gamma_a(\omega_a^2 - \gamma_a^2)} I_{aa}(\bar{\omega}) \quad (3.13)$$

erhält. Faßt man beide Teilprofile $\hat{I}_1(\omega)$ und $\hat{I}_2(\omega)$ zusammen, erhält man als Nenner des Gesamtprofils:

$$N_S = P_{ab}(-i\omega) P_{ab}^*(-i\omega)^* = [(\omega_1^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_1^2 \omega^2][(\omega_2^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_2^2 \omega^2] \quad (3.14a)$$

und für den Zähler mit Hilfe von REDUCE:

$$I_{aa\bar{z}}(\omega) = 2\gamma_a(\omega^2 - \omega_b^2 - K_L^2)^2 + 4(\omega^2 - \omega_b^2 - K_L^2)(K_V K_L^2 + 2\gamma_b(\gamma_a \gamma_b - K_V^2)) + 2\gamma_b(K_L^4 + 4(\omega_b^2 + K_L^2)(\gamma_a \gamma_b - K_V^2)) \quad (3.14b)$$

Obwohl diese Form der Intensität einfacher ist als die Ausdrücke in (3.9), sind diese doch notwendig zur Berechnung der zeitabhängigen Responsefunktionen, die später durchgeführt wird. Zunächst soll jedoch die Änderung der Eigenfrequenzen und Dämpfungskonstanten untersucht werden.

Anmerkung: Die Größenordnungen der Frequenzen und anderer Parameter in Bild 7 und den folgenden sind willkürlich gewählt, da nur die Verhältnisse γ/ω oder K/ω relevant sind. Sie können mit beliebigen Faktoren multipliziert werden.

III.2 Änderung der Eigenfrequenzen und Dämpfungskonstanten

Wie im vorigen Abschnitt gezeigt wurde, ergeben sich aus der Berechnung der Nullstellen des charakteristischen Polynoms $P_{ab}(-i\omega)$ von Gl.(3.1) die veränderten Dämpfungskonstanten γ_1 und γ_2 sowie die Eigenfrequenzen $w_{1/2} = \sqrt{\omega_{1/2}^2 - \gamma_{1/2}^2}$ (Gl.(3.8) und Anhang A4). Dabei zeigen die Eigenfrequenzen w_1 und w_2 in Abhängigkeit von der Lagenkopplung K_L und der Geschwindigkeitskopplung K_V folgendes Verhalten, wie es in Bild 8 beschrieben ist. Für $K_V = 0$ beginnen w_1 bzw. w_2 bei den Anfangswerten $w_a = \sqrt{\omega_a^2 - \gamma_a^2}$ bzw. $w_b = \sqrt{\omega_b^2 - \gamma_b^2}$. Ist nun $w_a > w_b$, nähert sich w_2 mit wachsendem K_L dem Grenzwert

$$w_m = \frac{1}{2} (\sqrt{\omega_a^2 - \gamma_a^2} + \sqrt{\omega_b^2 - \gamma_b^2}),$$

während w_1 allmählich anwächst und für große K_L eine lineare Funktion der Lagenkopplung wird. Setzt nun die Geschwindigkeitskopplung ein, nähern sich bei kleinen K_L w_1 bzw. w_2 dem Grenzwert w_m . Bei Anwachsen der Lagenkopplung macht sich der Einfluß von K_V immer weniger bemerkbar, beide Kurven nähern sich den Kurven $w_{1/2}(K_V=0)$. Dabei spielt allerdings die Wahl des Vorzeichenfaktors $\text{sgn } \Delta$ in Gl.(3.8c) eine Rolle. Für $\text{sgn } \Delta = 1$ bleibt die Bedeutung der $w_{1/2}$ erhalten, für große K_L gilt:

$$w_1(K_V \neq 0) \rightarrow w_1(K_V = 0), \quad w_2(K_V \neq 0) \rightarrow w_m,$$

während für $\text{sgn } \Delta = -1$ die $w_{1/2}$ vertauschen und das asymptotische Verhalten

$$w_1(K \neq 0) \rightarrow w_m, \quad w_2(K_V \neq 0) \rightarrow w_2(K_V = 0)$$

zeigen. Dieser Verlauf ist in Bild 8a) in Abhängigkeit von der Lagenkopplung K_L beschrieben. In Bild 8b) ist die Abhängigkeit der $w_{1/2}$ von der Geschwindigkeitskopplung K_V aufgezeichnet. Man sieht wieder, daß bei kleinem K_L das Anwachsen von K_V eine Angleichung der Eigenfrequenzen bewirkt und für große K_L nur die Vertauschung der Eigenfrequenzen verursacht. Für $w_a < w_b$ gilt das Obige sinngemäß, wenn man w_1 und w_2 vertauscht.

Betrachtet man nun die Dämpfungskonstanten, die in den Bildern 9a) und 9b) in Abhängigkeit von K_L und K_V gezeichnet sind, bemerkt man, daß für kleine Geschwindigkeitskopplung ein Anwachsen der Lagenkopplung bewirkt, daß γ_1 und γ_2 einem Grenzwert $\frac{1}{2}(\gamma_a + \gamma_b)$ zustreben (Bild 9a). Mit zunehmendem $|K_V|$ biegen sich allerdings die Kurven auf, wobei nun γ_1 anwächst und γ_2 stark abfällt. Für große Lagenkopplung ist γ_1 und $\gamma_2 \sim K_V$, so daß für $K_L \approx \omega_b$ $\gamma_1 \approx \gamma_a + \gamma_b$ und $\gamma_2 \approx 0$ werden kann.

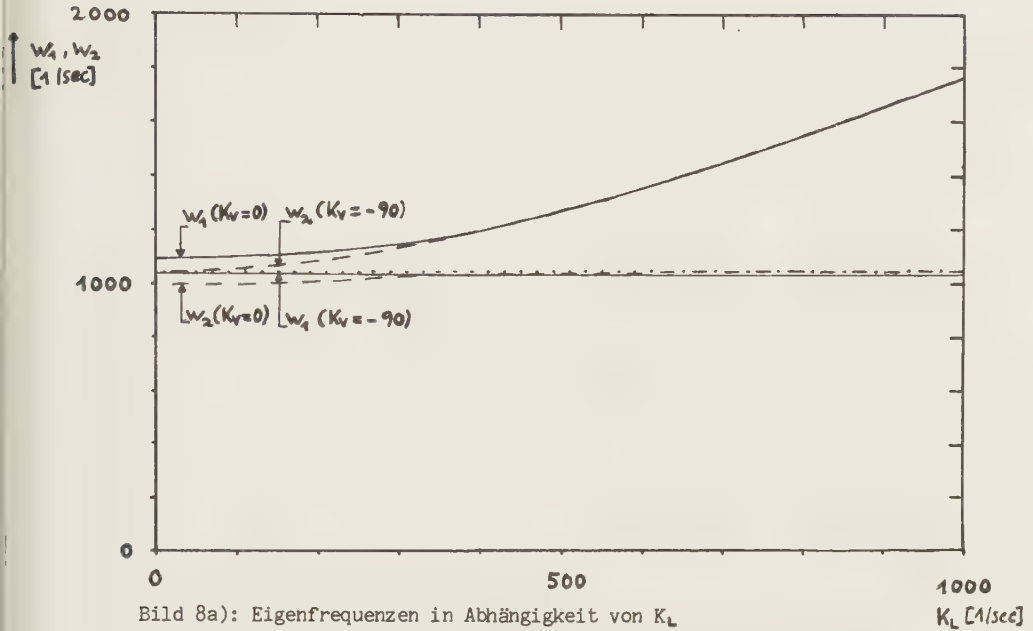


Bild 8a): Eigenfrequenzen in Abhängigkeit von K_L

$$\omega_a = 1100 \text{ sec}^{-1}, \omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}, \gamma_a = 100 \text{ sec}^{-1}, \gamma_b = 81 \text{ sec}^{-1}$$

$$\dots = (\sqrt{\omega_a^2 - \gamma_a^2} + \sqrt{\omega_b^2 - \gamma_b^2})/2$$

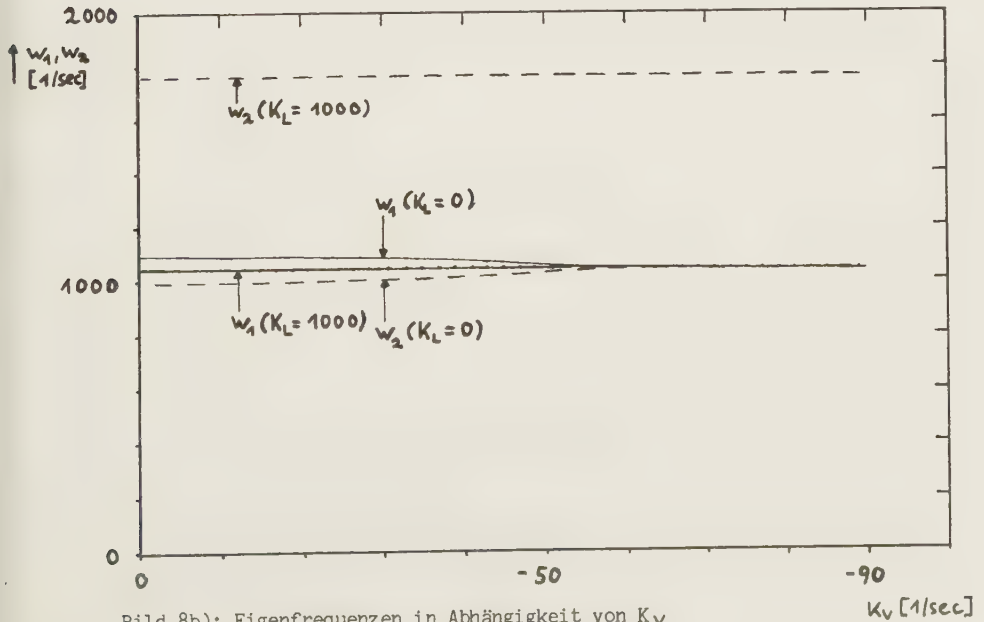


Bild 8b): Eigenfrequenzen in Abhängigkeit von K_V

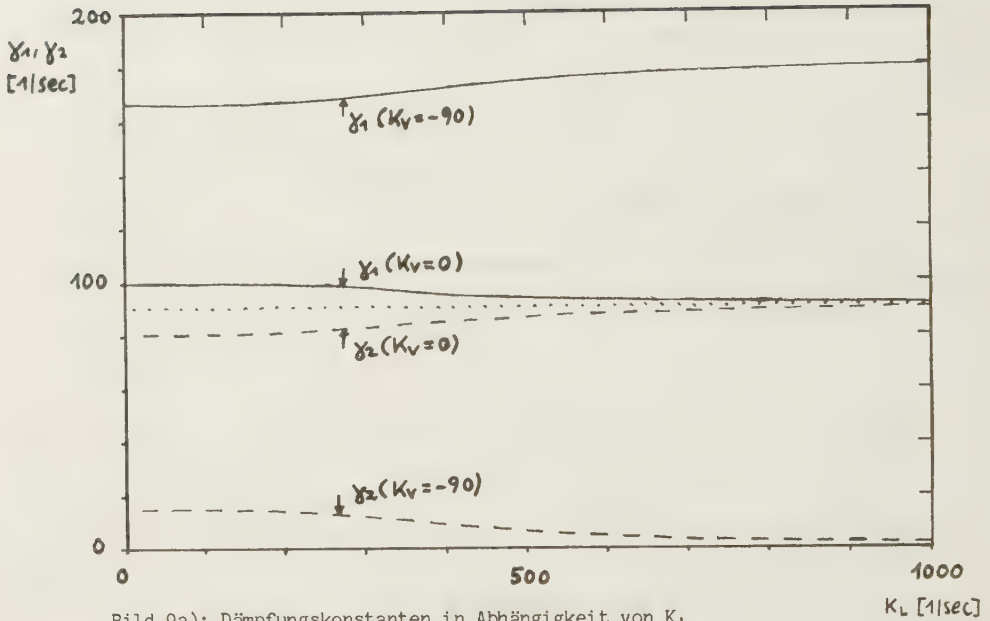


Bild 9a): Dämpfungskonstanten in Abhängigkeit von K_L

$$\omega_a = 1100 \text{ sec}^{-1}, \omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}, \gamma_a = 100 \text{ sec}^{-1}, \gamma_b = 81 \text{ sec}^{-1}$$

$$\dots = (\gamma_a + \gamma_b) / 2$$

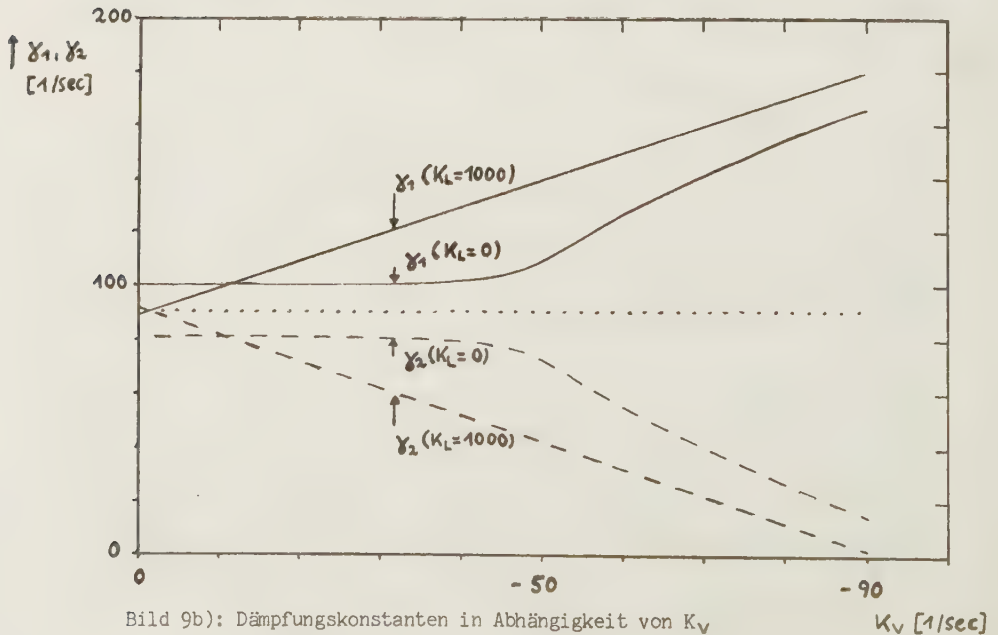


Bild 9b): Dämpfungskonstanten in Abhängigkeit von K_V

Die Konsequenzen dieses Verhaltens sollen im nächsten Kapitel diskutiert werden. Die Bilder 9a) und 9b) wurden für den Fall $\gamma_a > \gamma_b$ gezeichnet, für $\gamma_a < \gamma_b$ muß wieder γ_1 mit γ_2 vertauscht werden.

Insgesamt läßt sich sagen, daß die Änderung der Eigenfrequenzen stark von der Lagenkopplung abhängt, die dafür sorgt, daß der Frequenzabstand der beiden Moden zunimmt, wobei die Verschiebung beider Eigenfrequenzen unter dem Einfluß von K_L immer zu höheren Werten geht. Bestimmt die Lagenkopplung überwiegend das Verhalten des Systems, sind in den Absorptionsprofilen die Maxima immer rechts von den ungestörten Werten zu erwarten. Überwiegt aber der Einfluß der Geschwindigkeitskopplung, wandern die Frequenzschwerpunkte beider Moden auf einander zu.

Die Dämpfungskonstanten, die gleich den halben Linienbreiten des Absorptionsprofils sind, hängen stark von der Geschwindigkeitskopplung ab, wobei sich der Wert der kleineren Linienbreite weiter vermindert, der der größeren aber anwächst. Ein Einsetzen einer starken Lagenkopplung verstärkt diesen Effekt, so daß man für große K_L immer ein schmales und ausgeprägtes Maximum erwarten kann. Dabei hängt es vom Wert der Vorzeichenfunktion $\text{sgn } \Delta$ (Gl.(3.8c)) ab, bei welcher Frequenz dieses Maximum erscheint. Es kann der Fall eintreten, daß dieser Wert sich plötzlich verändert, da ja $\text{sgn } \Delta$ eine Funktion von K_L und K_V ist. Durch die Definition von $\text{sgn } \Delta$ in Gl.(3.8c) wurde vereinbart, daß die Mode 1 immer der Linienbreite zugeordnet ist, die für $K_L, K_V=0$ auf γ_a zurückgeht, während die Mode 2 die Mode mit $\gamma_2(K_L, K_V=0) = \gamma_b$ ist.

III.3 Absorptionsprofile

Die im letzten Abschnitt besprochenen Änderungen der Dämpfungen und der Eigenfrequenzen bedingen eine Veränderung des Absorptionsprofils bei Variation der Kopplungsparameter. Um den Verlauf des Profils aufzuzeichnen, wurde die Form verwendet, wie sie in Gl.(3.9) mit den Teilprofilen $\hat{I}_1(\omega)$ und $\hat{I}_2(\omega)$ und der Normierung (3.11) beschrieben wurde. Bild 10 zeigt die Änderung des Profils für verschwindende Geschwindigkeitskopplung mit den Lagekopplungen $K_L=0, 100, 500, 1000 \text{ sec}^{-1}$. Man sieht, daß sich mit wachsendem K_L allmählich zwei Maxima ausbilden. Die Frequenzschwerpunkte verschieben sich wie in III.2 besprochen. Die Mode mit der höheren ungestörten Eigenfrequenz driftet zu höheren Werten, die mit niedrigerer Frequenz zum Grenzwert $\frac{1}{2}(\omega_a + \omega_b)$, wie in Bild 8 gezeigt wurde. Mit wachsender Kopplung wird die Mode 2 zunehmend angeregt, ihr

Maximum wird größer als das der Mode 1. Der Grund ist in diesem Fall, daß die Dämpfungskonstante γ_2 immer kleiner ist als γ_1 , das Teilprofil $\hat{I}_2(\omega)$ (Gl.(3.9c)) hat eine geringere Breite als $\hat{I}_1(\omega)$, was bedeutet, daß die Relaxationszeit $1/\gamma_2$ größer wird als die der Mode 1. Es wird also über die Kopplung hauptsächlich die Mode 2 angeregt, während die Mode 1 stark gedämpft wird. Ist nun $\gamma_1 < \gamma_2$, tritt der umgekehrte Fall auf, die Mode 2 wird nun stark gedämpft, wie es in Bild 11 zu sehen ist. Man bemerkt den starken Einfluß, der durch das Verhältnis der Dämpfungen γ_a/γ_b auf das System ausgeübt wird. Ist $\gamma_b > \gamma_a$ (d.h. auch $\gamma_2 > \gamma_1$), wird das System insgesamt steifer, es reagiert weniger auf eine äußere Kraft. Ist umgekehrt $\gamma_1 > \gamma_2$, wird der Hauptteil der von außen in das System eingebrachten Energie auf die Mode 2 übertragen, während die Mode 1 wenig angeregt wird.

Schaltet man nun die Geschwindigkeitskopplung ein, verstärkt sich der oben besprochene Effekt. Wie in den folgenden Bildern 12a) für $K = -30 \text{ sec}^{-1}$ und 12b) für $K = -60 \text{ sec}^{-1}$ zu sehen ist, wird die Mode 1 weiter gedämpft, da sich ja die Dämpfungskonstante γ_1 erheblich vergrößert (Bild 9b). Gleichzeitig verringert sich die Dämpfungskonstante γ_2 , was dazu führt, daß

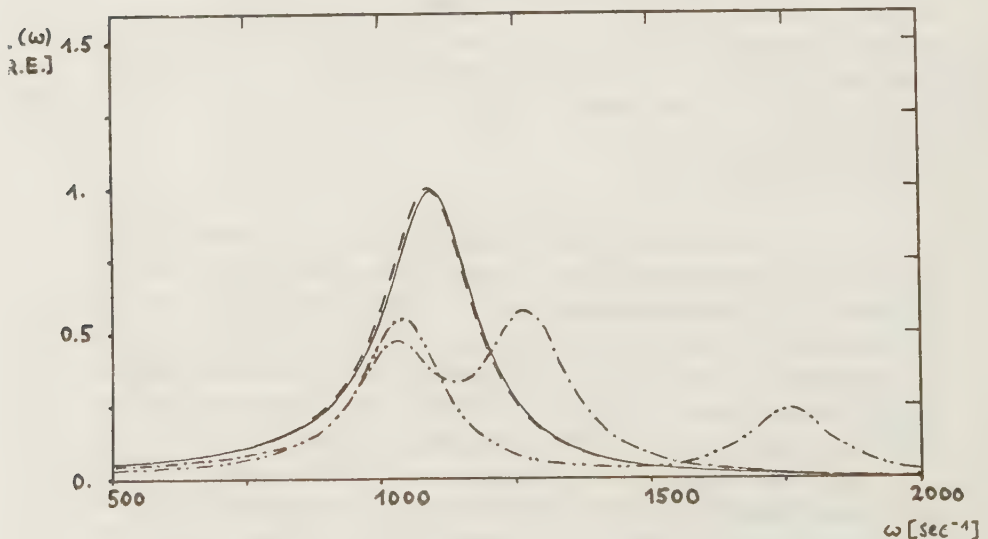


Bild 10: Absorptionsprofil für $K_v = 0$ und

$K_L = 0$ ----, $K_L = 100$ —, $K_L = 500$ -.-., $K_L = 1000$ -.-.-

$\omega_a = 1100 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_a = 100 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_b = 81 \text{ sec}^{-1}$

die Mode 2 eine erheblich geringere Breite, also eine größere Relaxationszeit als im ungestörten Profil bekommt. Ihr Maximum wächst über den Maximalwert des ungestörten Profils hinaus, es wird also an dieser Stelle mehr Leistung absorbiert als im ungestörten Fall und bei reiner Lagenkopplung. Läßt man die Lagenkopplung anwachsen, wechselt $\text{sgn} \Delta$ (Gl.(3.8c)) sein Vorzeichen, und der Schwerpunkt der langlebigeren Mode 2 wandert zu höheren Werten. Die Form der Kurven nähert sich den vergleichbaren in Bild 10, wobei nun das rechte Maximum, das durch die Mode 2 gebildet wird, bei wachsendem K_V immer stärker angehoben wird im Vergleich zu Bild 10, während das linke Maximum sich absenkt. Dies ergibt sich aus dem Verhalten der Dämpfungskonstanten, wie es in Bild 9 dargestellt ist.

Läßt man nun K_V gegen den Maximalwert $K_{V_{\max}} = -\sqrt{\gamma_a \gamma_b}$ gehen, ergeben sich überraschende Effekte (Bild 13). Während die Mode 1 weiter stark gedämpft wird, erhöht sich das Maximum der Mode 2 bei kleiner werdender Linienbreite, wie es schon oben beschrieben wurde. Gleichzeitig entsteht aber links von der langlebigen Mode 2 eine Nullstelle im Absorptionsprofil, d.h. an dieser Stelle wird vom System keine Energie absorbiert.

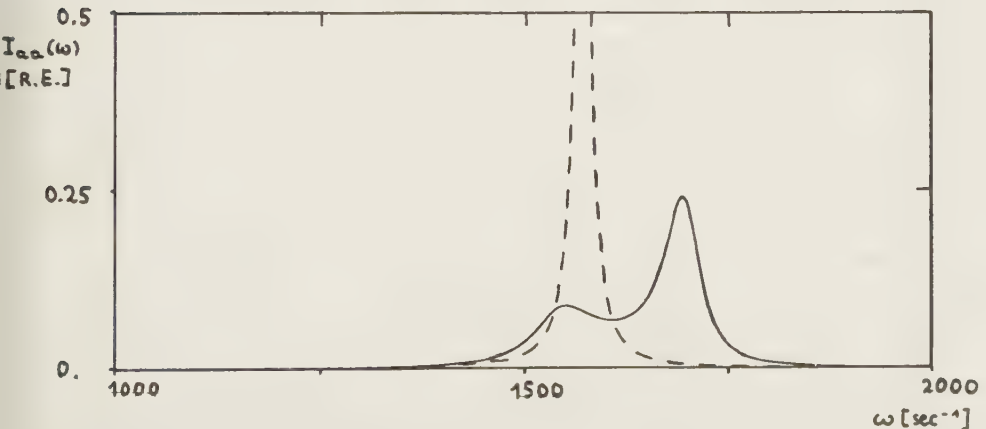


Bild 11: Absorptionsprofil für $K_V = 0$ und

$K_L = 0$ ---, $K_L = 500$ —

$\omega_a = 1570 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_b = 1510 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_a = 10 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_b = 62,5 \text{ sec}^{-1}$

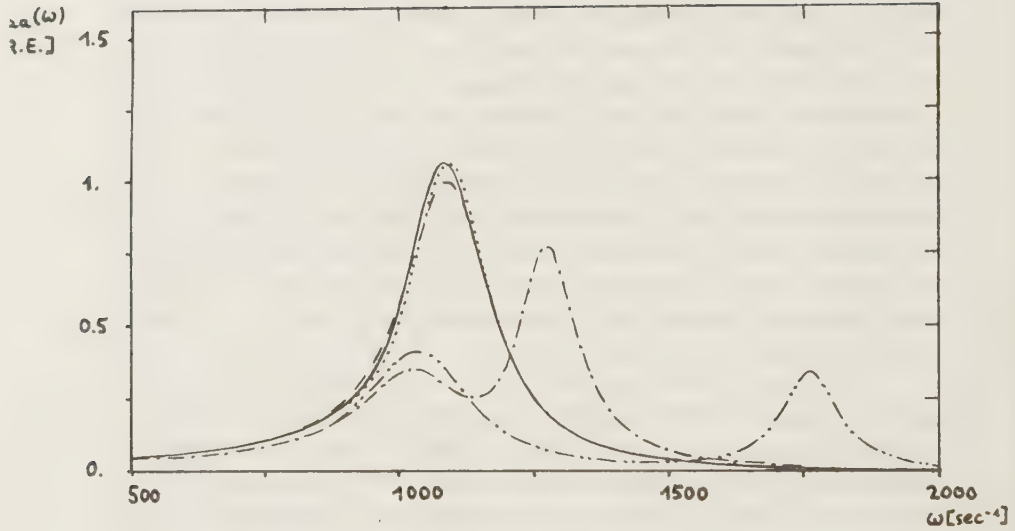


Bild 12a): Absorptionsprofil für $K_V = -30 \text{ sec}^{-1}$:

$K_L = 0$ — , $K_L = 100$, $K_L = 500$ -.-.- , $K_L = 1000$ ---

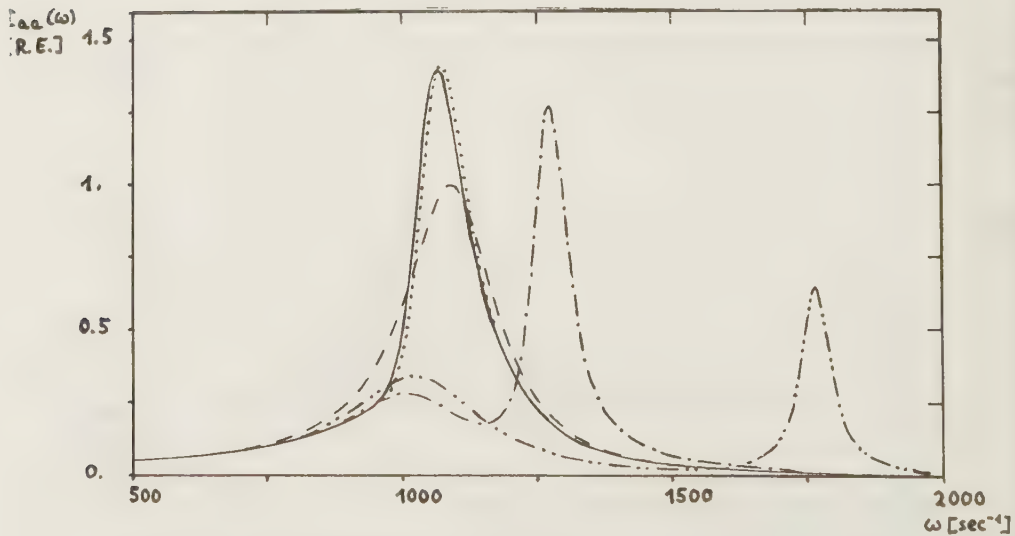


Bild 12b): Absorptionsprofil für $K_V = -60 \text{ sec}^{-1}$:

$K_L = 0$ — , $K_L = 100$, $K_L = 500$ -.-.- , $K_L = 1000$ ---

12a), 12b): $\omega_a = 1100 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_a = 100 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_b = 81,0 \text{ sec}^{-1}$

Absorptionsprofil für $K_L = 0$, $K_V = 0$: - - -

Dies macht sich auch bei $K_L = 1000 \text{ sec}^{-1}$ schwach bemerkbar, wie die Spreizung des Profils in Bild 14a) beweist. Ihr Auftreten erinnert an das Phänomen der Evans-Holes in Molekülspektren [27,28]. Untersucht man den Zähler der Intensität $I_{aa}(\omega)$ von Gl.(3.14b), stellt man fest, daß dieser genau eine Nullstelle hat, wenn

$$K_V = -\sqrt{\gamma_a \gamma_b} \quad \omega^2 = \omega_E^2 = \omega_b^2 + K_L^2 (1 + \sqrt{\gamma_b / \gamma_a}) \quad (3.15)$$

Das Auftreten von Absorptionslöchern im Profil für ein System "angeregter Oszillator - nicht angeregter Oszillator" hängt davon ab, daß im System die maximale Geschwindigkeitskopplung erreicht wird. Mit wachsendem K_L verschiebt sich ω_E nach höheren Werten, wobei das Minimum zunehmend flacher wird und sich von seiner Umgebung nur noch wenig abhebt (Bild 14a). Das Auftreten von Nullstellen soll später noch ausführlicher erörtert werden.

Rechts von diesen Nullstellen befindet sich in dem obigen Beispiel immer das Maximum der Mode 2. Entsprechend dem Verhalten von γ_2 (Bild 9) ist die Höhe des Maximums für $K_V = -90 \text{ sec}^{-1}$ und $K_L = 0$ etwa das 3,5-fache der Höhe des ungestörten Profils. Sie wächst für $K_V = -90 \text{ sec}^{-1}$ und

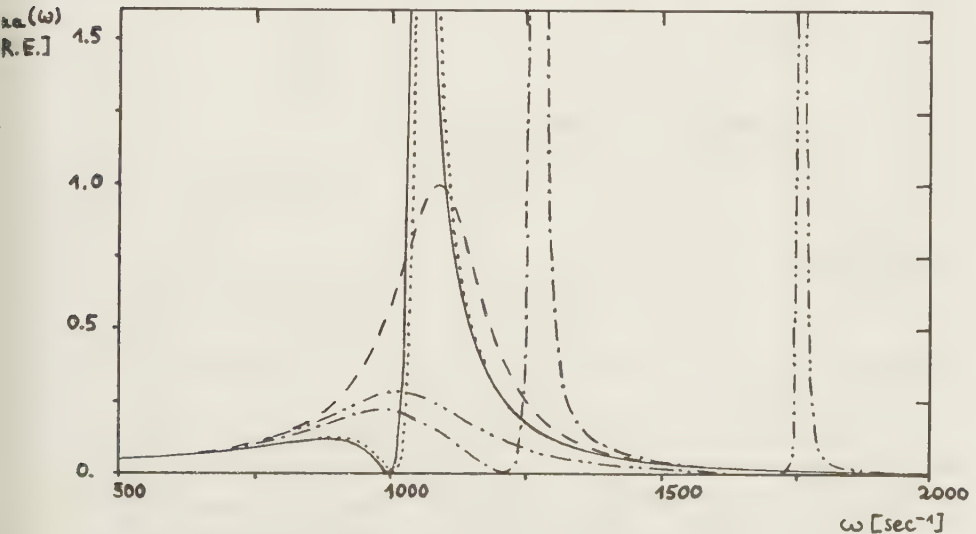


Bild 13: Absorptionsprofil für $K_V = -90 \text{ sec}^{-1}$:

$K_L = 0$ — , $K_L = 100$, $K_L = 500$ -.-.- , $K_L = 1000$ - - -

$\omega_a = 1100 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_a = 100 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_b = 81 \text{ sec}^{-1}$

Absorptionsprofil für $K_L = 0$, $K_V = 0$: - - -

$K_L = 1000 \text{ sec}^{-1}$ auf das 11,6-fache mit der Linienbreite

$$2\gamma_2(K_L = 1000 \text{ sec}^{-1}, K_V = -90 \text{ sec}^{-1}) = 3,612 \text{ sec}^{-1}$$

wie in Bild 14 gezeigt wird. Das Maximum befindet sich bei $1763,1 \text{ sec}^{-1}$. Man kann also mit der Kombination von Lagen- und Geschwindigkeitskopplung Moden erzeugen, deren Lebensdauer erheblich länger ist als die der nicht gekoppelten Schwingungen, obwohl der Abstand der Eigenfrequenzen der beiden Oszillatoren relativ groß ist. Was im Folgenden zu untersuchen ist, ist das Verhalten zweier Moden, deren Eigenfrequenzen leicht verstimmt sind, wobei die Lagenkopplung verschwinden soll. Dies soll im Hinblick auf Anwendungen bei Gasgemischen von Oszillatorpaaren und einem Neutralgas geschehen, wo die Lagenkopplung vernachlässigt werden kann.

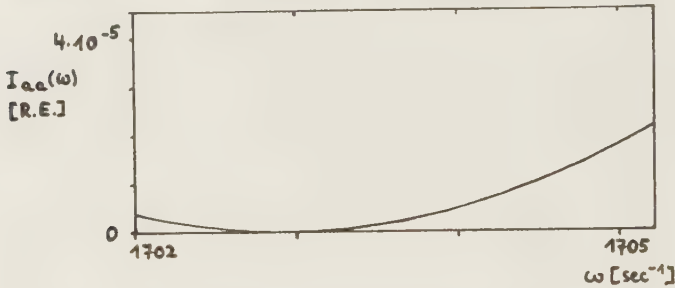


Bild 14a): Spreizung für $I_{aa}(\omega)$ aus Bild 13 für
 $K_L = 1000 \text{ sec}^{-1}$ und $K_V = -90 \text{ sec}^{-1}$

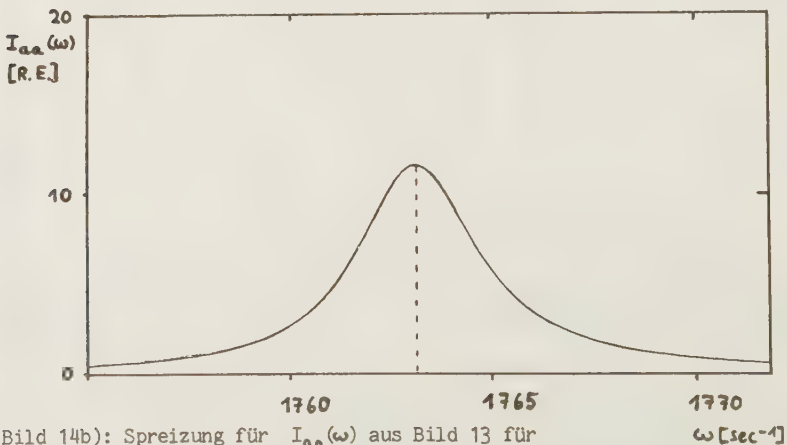


Bild 14b): Spreizung für $I_{aa}(\omega)$ aus Bild 13 für
 $K_L = 1000 \text{ sec}^{-1}$ und $K_V = -90 \text{ sec}^{-1}$

III.4 Zerlegung der Responsefunktionen und die Responsefunktionen für zwei angeregte Oszillatoren

In gleicher Weise, wie in Abschnitt III.1 das Absorptionsprofil $\hat{I}_{aa}(\omega)$ in die Teilprofile $\hat{I}_1(\omega)$ und $\hat{I}_2(\omega)$ zerlegt wurde (Gl.(3.9)), lassen sich die Responsefunktionen $\chi_{aa}(\omega)$ und $\chi_{ba}(\omega)$ aufspalten. Definiert man für die Mode 1 bzw. 2 die dispersive Response

$$\chi'_{1/2}(\omega) = \frac{1}{m} \frac{\omega_{1/2}^2 - \omega^2}{(\omega_{1/2}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{1/2}^2 \omega^2} \quad (3.16a)$$

und die absorptive Response

$$\chi''_{1/2}(\omega) = \frac{1}{m} \frac{2\gamma_{1/2}\omega}{(\omega_{1/2}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_{1/2}^2 \omega^2} \quad (3.16b)$$

erhält man mit z_1 , z_{r1} , z_{r2} und N von Gl.(3.9d) für die Responsefunktion $\chi_{aa}(\omega)$ mit Hilfe von REDUCE:

$$\chi_{aa}(\omega) = \chi'_{aa}(\omega) + i\chi''_{aa}(\omega) \quad (3.17a)$$

mit

$$\chi'_{aa}(\omega) = \frac{z_{r1} + z_{r2}}{N} \chi'_1(\omega) + \frac{z_i}{N} \omega \chi''_1(\omega) + \frac{z_{r1} - z_{r2}}{N} \chi'_2(\omega) - \frac{z_i}{N} \omega \chi''_2(\omega) \quad (3.17b)$$

$$\chi''_{aa}(\omega) = \frac{z_{r1} + z_{r2}}{N} \chi''_1(\omega) - \frac{z_i}{N} \omega \chi'_1(\omega) + \frac{z_{r1} - z_{r2}}{N} \chi''_2(\omega) + \frac{z_i}{N} \omega \chi'_2(\omega) \quad (3.17c)$$

Dividiert man die absorptive Response $\chi''_{aa}(\omega)$ durch ω , erhält man wieder die Intensität $\hat{I}_{aa}(\omega)$ von Gl.(3.9). Die dispersive Response $\chi'_{aa}(\omega)$ ist eine gerade Funktion von ω , sie setzt sich wiederum zusammen aus den dispersiven Responsefunktionen $\chi'_1(\omega)$ und $\chi'_2(\omega)$ mit einem zusätzlichen Anteil der absorptiven Responsefunktionen $\chi''_1(\omega)$ und $\chi''_2(\omega)$.



Bild 15: Die dispersive Response $\chi'_{aa}(\omega)$ (—) mit den Teilkurven

$$\frac{z_{r1} + z_{r2}}{N} \chi'_1(\omega) + \frac{z_i}{N} \omega \chi''_1(\omega) \text{ ----}$$

$$\text{und } \frac{z_{r1} - z_{r2}}{N} \chi'_2(\omega) - \frac{z_i}{N} \omega \chi''_2(\omega) \text{}$$

für $K_L = 500 \text{ sec}^{-1}$ und $K_V = -30 \text{ sec}^{-1}$ und die ungestörte dispersive Response $\chi'_{aa}(\omega, K_L=0, K_V=0)$ (-.-.-).

$\omega_a = 1100 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_a = 100 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_b = 81 \text{ sec}^{-1}$

Im kopplungsfreien Fall ($K_L=0$, $K_V=0$) ist

$$\chi'_{aa}(\omega, K_L = 0, K_V = 0) = \chi'_1(\omega) \quad ,$$

wie es schon in der Literatur [39] für den gedämpften harmonischen Oszillator bekannt ist. Ein typischer Verlauf von $\chi'_{aa}(\omega)$ ist in Bild 15 dargestellt, wobei die Nullstellen der Teilkurven etwa bei den Frequenzen ω_1 bzw. ω_2 liegen.

In gleicher Weise läßt sich die Responsefunktion $\chi_{ba}(\omega)$ zerlegen. Mit Hilfe von REDUCE bekommt man :

$$\chi_{ba}(\omega) = \chi'_{ba}(\omega) + i \chi''_{ba}(\omega) \quad (3.18a)$$

mit

$$\chi'_{ba}(\omega) = \frac{\bar{z}_{r1} + \bar{z}_{r2}}{N} \chi'_1(\omega) + \frac{\bar{z}_i}{N} \omega \chi''_1(\omega) + \frac{\bar{z}_{r1} - \bar{z}_{r2}}{N} \chi'_2(\omega) - \frac{\bar{z}_i}{N} \omega \chi''_2(\omega) \quad (3.18b)$$

$$\chi''_{ba}(\omega) = \frac{\bar{z}_{r1} + \bar{z}_{r2}}{N} \chi''_1(\omega) - \frac{\bar{z}_i}{N} \omega \chi'_1(\omega) + \frac{\bar{z}_{r1} - \bar{z}_{r2}}{N} \chi''_2(\omega) + \frac{\bar{z}_i}{N} \omega \chi'_2(\omega) \quad (3.18c)$$

und den Konstanten

$$\begin{aligned} \bar{z}_{r1} &= u (K_L^2 - 2\gamma_s K_V) + 2\gamma_d (\gamma_d K_L^2 - K_V \Omega_d) \\ \bar{z}_{r2} &= 2\Gamma (\gamma_s K_L^2 - K_V (u + \Omega_s)) - \frac{1}{2} \Delta K_L^2 \\ \bar{z}_i &= \Gamma K_L^2 - K_V \Delta \end{aligned} \quad (3.18d)$$

und N aus Gl.(3.9d). Man sieht, daß für $K_L=0$ und $K_V=0$ $\chi''_{ba}(\omega)$ verschwindet, wie es im kopplungsfreien Fall sein muß, da $x_b(t)$ nicht angeregt wird und der Mittelwert daher Null ergibt.

Im bisherigen Modell wurde angenommen, daß die äußere Kraft nur auf die Oszillatoren $x_a(t)$ wirkt, die über die Kopplung die $x_b(t)$ beeinflussen. Da der Index "a" willkürlich gewählt wurde, läßt sich das Modell auch so formulieren, daß die Oszillatoren "b" von der äußeren Kraft angeregt werden, d.h. man ersetzt $H_{ex}(t)$ in Gl.(2.60) durch

$$H_{ex}(t) = -F(t) x_b(t) \quad (3.19)$$

was bedeutet, daß man die Lösungen $\langle x_a(t) \rangle_{H_S}$ und $\langle x_b(t) \rangle_{H_S}$ erhält, indem man in Gl.(2.74) die Indizes "a" und "b" vertauscht:

$$\langle x_a(t) \rangle_{H_S} = \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') \chi_{ab}(t-t') \quad (3.20a)$$

$$\langle x_b(t) \rangle_{H_S} = \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') \chi_{bb}(t-t') \quad (3.20b)$$

Die Responsefunktionen $\chi_{bb}(\omega)$ und $\chi_{ab}(\omega)$ erhält man nun, wenn man in z_{r1} , z_{r2} , z_i und N von Gl.(3.9d) und $\bar{z}_{r1}$, $\bar{z}_{r2}$ und $\bar{z}_i$ von Gl.(3.18d) die Indizes "a" und "b" vertauscht, wenn also Ω_d durch $-\Omega_d$ und γ_d durch $-\gamma_d$ ersetzt

werden. Damit ist

$$\chi_{bb}(\omega) = \chi_{aa}(\omega, \Omega_a \rightarrow -\Omega_a, \gamma_a \rightarrow -\gamma_a) \quad (3.21a)$$

$$\chi_{ab}(\omega) = \chi_{ba}(\omega) \quad (3.21b)$$

Mit diesen Responsefunktionen lassen sich nun die Lösungen zu einem System finden, bei dem sowohl $x_a(t)$ als auch $x_b(t)$ durch eine äußere Kraft angeregt werden. Die äußere Störung wird nun durch

$$H_{ex}(t) = -F(t)(x_a(t) + s x_b(t)) \quad (3.22)$$

ausgedrückt, wobei "s" ein Proportionalitätsfaktor ist, der die relative Stärke der Kraft auf $x_b(t)$ bezüglich der Kraft auf $x_a(t)$ ausdrückt. Mit der Gesamthamiltonfunktion H_S von Gl.(2.59) erhält man wieder in erster Näherung die Verteilungsfunktion:

$$g_S(t) = g_S^F + \int_{t_1}^t dt' e^{-iL_S^0(t-t')} F(t') [\{g_S^F, x_a(t')\} + s \{g_S^F, x_b(t')\}] \quad (3.23)$$

wobei g_S^F wieder die Verteilungsfunktion des ungestörten Systems ist. Damit erhält man wieder nach der Linear-Response-Theorie die Lösungen für $\langle x_a(t) \rangle$ bzw. $\langle x_b(t) \rangle$ ($t_1 \rightarrow -\infty$):

$$\langle x_a(t) \rangle_{H_S} = \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') [\chi_{aa}(t-t') + s \chi_{ab}(t-t')] \quad (3.24a)$$

$$\langle x_b(t) \rangle_{H_S} = \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') [\chi_{ba}(t-t') + s \chi_{bb}(t-t')] \quad (3.24b)$$

mit den Responsefunktionen aus den Gln.(3.17), (3.18) und (3.21). Die vom System aufgenommene Energie kann dann analog zu Gl.(2.78b) als

$$\Delta E = \int_{-T}^T dt F(t) \left[\frac{\partial}{\partial t} \langle x_a(t) \rangle_{H_S} + s \frac{\partial}{\partial t} \langle x_b(t) \rangle_{H_S} \right] \quad (3.25)$$

geschrieben werden, was über das Wiener-Khinchin-Theorem entsprechend Gl.(2.80) ergibt:

$$\Delta E = \int \frac{d\omega}{2\pi} |F(\omega)|^2 \omega (\chi''_{aa}(\omega) + 2s \chi''_{ab}(\omega) + s^2 \chi''_{bb}(\omega)) \quad (3.26)$$

Daraus berechnet sich wieder die Intensität:

$$\begin{aligned} \hat{I}(\omega) &= \hat{I}_{aa}(\omega) + 2s \hat{I}_{ab}(\omega) + s^2 \hat{I}_{bb}(\omega) \\ &= \frac{1}{\omega} [\chi''_{aa}(\omega) + 2s \chi''_{ab}(\omega) + s^2 \chi''_{bb}(\omega)] \end{aligned} \quad (3.27)$$

Das Absorptionsverhalten des Systems speziell unter dem Einfluß der Geschwindigkeitskopplung soll im nächsten Kapitel erläutert werden. Mit diesen Beziehungen ist man nun in der Lage, das zeitliche Verhalten des Systems zu beschreiben.

III.5 Berechnung der zeitabhängigen Responsefunktionen

Zur Berechnung der Lösungen $\langle x_a(t) \rangle$ bzw. $\langle x_b(t) \rangle$ nach den Gln.(2.74) oder (3.24) müssen zunächst die zeitabhängigen Responsefunktionen $\chi_{aa}(t-t')$, $\chi_{ab}(t-t')$ und $\chi_{bb}(t-t')$ über die Fouriertransformation hergeleitet werden ($\beta, \gamma = a, b$):

$$\chi_{\beta\gamma}(t-t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} \chi_{\beta\gamma}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} \quad (3.28)$$

Nach den Gln.(3.17), (3.18) und (3.21) setzen sich die Responsefunktionen aus Kombinationen der dispersiven bzw. absorptiven Responsefunktionen $\chi'_{1/2}(\omega)$ und $\chi''_{1/2}(\omega)$ (Gl.(3.16)) zusammen, so daß man sich darauf beschränken kann, deren Fouriertransformierten und die der mit ω multiplizierten Größen zu berechnen. Die Integration läßt sich durchführen, indem man den Integrationsweg auf die komplexe ω -Ebene ausdehnt und über den Residuensatz den Beitrag der Pole von $\chi'_{1/2}(\omega)$ bzw. $\chi''_{1/2}(\omega)$ berechnet. Die Nenner der Responsefunktionen

$$P_{1/2}(\omega) = (\omega^2 - \omega_{1/2}^2) + 4\gamma_{1/2}^2 \omega^2$$

besitzen Nullstellen bei:

$$\omega_{I/II} = \omega_1 \pm i\gamma_1 \quad \omega_{III/IV} = -\omega_1 \pm i\gamma_1 \quad (3.29a)$$

bzw.

$$\omega'_{1/2} = \omega_2 \pm i\gamma_2 \quad \omega'_{III/IV} = -\omega_2 \pm i\gamma_2 \quad (3.29b)$$

mit $\omega_{1/2} = \sqrt{\omega_{1/2}^2 - \gamma_{1/2}^2}$ und $\omega_{1/2}, \gamma_{1/2}$ aus Gl.(3.8).

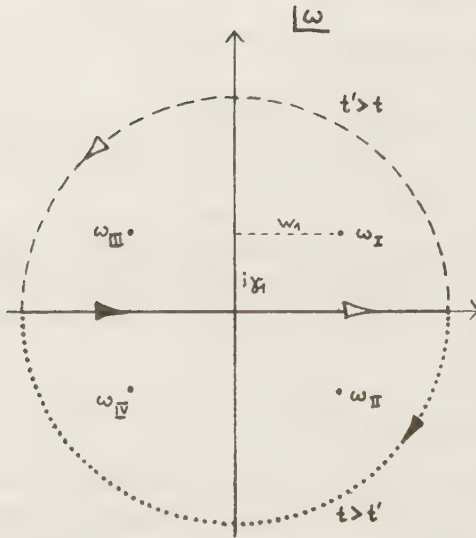


Bild 16: Integrationswege und Lage der Pole in der komplexen ω -Ebene für $\chi_1'(\omega)$ bzw. $\chi_1''(\omega)$

Für $\chi_1'(\omega)$ bzw. $\chi_1''(\omega)$ ist die Lage der Pole in Bild 16 dargestellt. Der Integrationsweg, der auf der reellen Achse von $-\infty$ bis ∞ verläuft, wird durch den oberen oder unteren Halbkreis geschlossen. Aus Kausalitätsgründen muß man für $t > t'$ den unteren Halbkreis nehmen, dessen Beitrag im Unendlichen verschwindet. Dabei werden die Pole bei ω_{II} und ω_{IV} im mathematisch negativen Sinn umschlossen. Für $t' > t$ muß man den Integrationsweg durch den oberen Halbkreis vervollständigen, der nun die Pole bei ω_I und ω_{III} im mathematisch positiven Sinn einschließt. Mit Hilfe des Residuensatzes erhält man nun

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{\chi}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} = i\theta(t'-t) \sum_{\substack{I, III}} [\tilde{\chi}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} (\omega - \omega_p)]_{\omega=\omega_p} - i\theta(t-t') \sum_{\substack{II, IV}} [\tilde{\chi}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} (\omega - \omega_p)]_{\omega=\omega_p} \quad (3.30)$$

wobei $\tilde{\chi}(\omega)$ für die jeweiligen Responsefunktionen steht. Die explizite Berechnung und Zusammenfassung ergibt dann folgende Fouriertransformierten, wenn man noch die Abkürzung $\tau = t-t'$ und als Vorzeichenfunktion $\text{sgn } \tau = \theta(\tau) - \theta(-\tau)$ einführt:

$$\chi_{1/2}'(\tau) = e^{-\gamma_{1/2} \text{sgn } \tau \cdot \tau} \frac{\text{sgn } \tau \cdot \sin \omega_{1/2} \tau}{2m \omega_{1/2}} \quad (3.31a)$$

$$\chi_{1/2}''(\tau) = e^{-\gamma_{1/2} \text{sgn } \tau \cdot \tau} \frac{\sin \omega_{1/2} \tau}{2m \omega_{1/2}} \quad (3.31b)$$

$$\text{FT} [\omega \chi'_{12}(\omega)](\tau) = i \frac{e^{-\gamma_{12} \text{sgn} \tau \cdot \tau}}{2m} \left[\text{sgn} \tau \cdot \cos w_{12} \tau - \frac{\gamma_{12}}{w_{12}} \sin w_{12} \tau \right] \quad (3.31c)$$

$$\text{FT} [\omega \chi''_{12}(\omega)](\tau) = \frac{e^{-\gamma_{12} \text{sgn} \tau \cdot \tau}}{2m} \left[\cos w_{12} \tau - \frac{\gamma_{12}}{w_{12}} \text{sgn} \tau \cdot \sin w_{12} \tau \right] \quad (3.31d)$$

Die obigen Beziehungen lassen sich nun verwenden, um mit Hilfe der Gln.(3.17), (3.18) und (3.21) die Responsefunktionen $\chi_{\beta\gamma}(\tau)$ ($\beta, \gamma=a, b$) zu berechnen. Führt man folgende Bezeichnungen ein:

$$\begin{aligned} c_{aa}^1 &= \frac{1}{w_1} \left(\frac{z_{r1} + \bar{z}_{r2}}{N} - \gamma_1 \frac{\bar{z}_i}{N} \right), \quad c_{aa}^2 = \frac{1}{w_2} \left(\frac{z_{r1} - \bar{z}_{r2}}{N} + \gamma_2 \frac{\bar{z}_i}{N} \right) \\ c_{ab}^1 &= \frac{1}{w_1} \left(\frac{\bar{z}_{r1} + \bar{z}_{r2}}{N} - \gamma_1 \frac{\bar{z}_i}{N} \right), \quad c_{ab}^2 = \frac{1}{w_2} \left(\frac{\bar{z}_{r1} - \bar{z}_{r2}}{N} + \gamma_2 \frac{\bar{z}_i}{N} \right) \\ c_{aa}^i &= \frac{\bar{z}_i}{N}, \quad c_{ab}^i = \frac{\bar{z}_i}{N}, \quad c_{bb}^i = c_{aa}^i (\Omega_d \rightarrow -\Omega_d, \gamma_d \rightarrow -\gamma_d), \quad c_{bb}^{1/2} = c_{aa}^{1/2} (\Omega_d \rightarrow -\Omega_d, \gamma_d \rightarrow -\gamma_d) \end{aligned} \quad (3.32)$$

(siehe Gln.(3.9d), (3.18d))

erhält man mit REDUCE die Responsefunktionen:

$$\begin{aligned} \chi_{\beta\gamma}(\tau) &= \frac{\Theta(\tau)}{m} \left[e^{-\gamma_1 \tau} (c_{\beta\gamma}^1 \sin w_1 \tau + c_{\beta\gamma}^i \cos w_1 \tau) \right. \\ &\quad \left. + e^{-\gamma_2 \tau} (c_{\beta\gamma}^2 \sin w_2 \tau - c_{\beta\gamma}^i \cos w_2 \tau) \right] \end{aligned} \quad (3.33a)$$

mit $\beta, \gamma=a, b$, wobei noch gilt:

$$\chi_{\beta\gamma}(\tau) = \chi_{\gamma\beta}(\tau) \quad (3.33b)$$

Drei Beispiele mögen dies verdeutlichen:

i.) Rückführung auf den kopplungsfreien Fall: $K_L=0$, $K_V=0$

Dafür erhält man wieder:

$$\begin{aligned} \omega_a &= \omega_a, \quad \omega_b = \omega_b, \quad \gamma_1 = \gamma_s + \gamma_d = \gamma_a, \quad \gamma_2 = \gamma_s - \gamma_d = \gamma_b \\ \Gamma &= |\gamma_d|, \quad \Delta = |\Omega_d|, \quad w_{1/2} = \sqrt{\omega_{a/b}^2 - \gamma_{a/b}^2} \end{aligned}$$

was für $\gamma_d, \Omega_d > 0$ ergibt:

$$\begin{aligned} c_{aa}^1 &= \frac{1}{w_1}, \quad c_{aa}^2 = 0, \quad c_{aa}^i = 0, \quad c_{ab}^1 = c_{ab}^2 = c_{ab}^i = 0 \\ c_{bb}^1 &= 0, \quad c_{bb}^2 = \frac{1}{w_2}, \quad c_{bb}^i = 0 \end{aligned}$$

Dies in (3.33) eingesetzt, ergibt:

$$\chi_{aa}(\tau) = \frac{\Theta(\tau)}{m} e^{-\gamma_a \tau} \frac{\sin w_1 \tau}{w_1}, \quad \chi_{bb}(\tau) = \frac{\Theta(\tau)}{m} e^{-\gamma_b \tau} \frac{\sin w_2 \tau}{w_2}$$

$$\chi_{ab}(\tau) = 0$$

was wieder mit der Responsefunktion des einfachen gedämpften Oszillators übereinstimmt [39].

ii.) Gleiche Eigenfrequenz der ungestörten Oszillatoren und verschwindende

Lagenkopplung: $\Omega_d = 0$, $K_L = 0$

Man erhält:

$$\omega_{1/2} = \omega_a, \quad \Delta = 0$$

$$\gamma_{1/2} = \gamma_s \pm \sqrt{\gamma_d^2 + K_V^2}, \quad \Gamma = \sqrt{\gamma_d^2 + K_V^2}, \quad w_{1/2} = \sqrt{\omega_a^2 - \gamma_{1/2}^2}$$

was wieder ergibt:

$$c_{aa}^{1/2} = \frac{1}{2w_{1/2}} \left(1 \pm \frac{\gamma_d}{\sqrt{\gamma_d^2 + K_V^2}} \right), \quad c_{ab}^{1/2} = \mp \frac{1}{2w_{1/2}} \frac{K_V}{\sqrt{\gamma_d^2 + K_V^2}}$$

$$c_{bb}^{1/2} = \frac{1}{2w_{1/2}} \left(1 \mp \frac{\gamma_d}{\sqrt{\gamma_d^2 + K_V^2}} \right), \quad c_{aa}^i = c_{ab}^i = c_{bb}^i = 0$$

Damit hat man folgende Responsefunktionen:

$$\chi_{aa}(\tau) = X_1(\tau) + \frac{\gamma_d}{\sqrt{\gamma_d^2 + K_V^2}} X_2(\tau)$$

$$\chi_{ab}(\tau) = -\frac{K_V}{\sqrt{\gamma_d^2 + K_V^2}} X_2(\tau)$$

$$\chi_{bb}(\tau) = X_1(\tau) - \frac{\gamma_d}{\sqrt{\gamma_d^2 + K_V^2}} X_2(\tau)$$

$$\text{mit } X_{1/2}(\tau) = \left(\frac{e^{-\gamma_1 \tau}}{2m w_1} \sin w_1 \tau \pm \frac{e^{-\gamma_2 \tau}}{2m w_2} \sin w_2 \tau \right) \cdot \Theta(\tau)$$

iii.) Leicht verstimmte Oszillatoren mit gleicher Linienbreite und

verschwindender Lagenkopplung: $K_L = 0$, $\gamma_a = 0$, $\omega_{a/b} = \omega_s (1 \pm \delta)$

Dieser Fall soll unter der Voraussetzung besprochen werden, daß $|\delta| \ll 1$ und die Linienbreite $\gamma_a = \gamma_b = \gamma_s$ von der Größenordnung $\gamma_s \approx 10^{-4} \omega_a \approx 10^{-4} \omega_s$ ist. Ferner soll angenommen werden, daß die Größe der Geschwindigkeitskopplung mindestens einen Wert besitzt, bei dem schon merkbare Effekte auf die Oszillatoren wirken. Dies bedeutet, daß man etwa folgende Relationen annehmen kann:

$$|\delta| \approx 10^{-3}, \quad \gamma_s \approx 10^{-4} \omega_s, \quad |K_V| \geq 0.3 \gamma_s = 0.03 \omega_s$$

In niederster Ordnung von δ erhält man:

$$\Omega_5 = \omega_s^2 (1 + \delta^2) \quad , \quad \Omega_4 = 2 \Omega_5 \delta$$

Zur Berechnung der geänderten Eigenfrequenzen und Linienbreiten muß das Korrekturglied U als Lösung von Gl.(3.8d) errechnet werden. Aus (3.8d) erhält man mit den obigen Näherungen:

$$HX = U^3 + 2U^2(\Omega_5[1 + \sigma(10^{-2})]) + 4U\Omega_5(\delta^2\Omega_5 + K_V^2) + 8\delta^2\Omega_5^2 K_V^2 = 0$$

was mit $\epsilon^2 = (\delta^2\Omega_5/K_V^2) \approx 10^{-3}$ nach obigen Abschätzungen folgenden Ausdruck ergibt:

$$U^3 + 2U^2\Omega_5 + 4K_V^2\Omega_5 U(1 + \epsilon^2) + 8\delta^2\Omega_5^2 K_V^2 = 0 \quad (3.34)$$

Man erhält als Lösung bei Vernachlässigung des ersten und zweiten Terms von (3.34):

$$U_0 = \frac{-2\delta^2\Omega_5}{1 + \epsilon^2} \approx -2\delta^2\Omega_5(1 - \epsilon^2) = -2K_V^2\epsilon^2(1 - \epsilon^2) \quad (3.35a)$$

was wieder für Δ und Γ aus Gl.(3.8b,c) ergibt:

$$\Delta = -\sqrt{4\delta^4\Omega_5^2(1 - \epsilon^2)^2 - 4\delta^2\Omega_5^2 + 4\delta^2\epsilon^2\Omega_5^2 + 4\delta^4\Omega_5^2} \approx -2\delta\epsilon\Omega_5 \quad (3.35b)$$

$$\Gamma = \sqrt{-K_V^2\epsilon^2(1 - \epsilon^2) + K_V^2} \approx |K_V|(1 - \frac{\epsilon^2}{2}) \quad (3.35c)$$

Daraus folgen die geänderten Eigenfrequenzen und Linienbreiten:

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \Omega_5 - 2\delta^2\Omega_5 - 2\delta\epsilon\Omega_5 \approx \Omega_5(1 - 2\delta\epsilon) \\ \omega_2^2 &= \Omega_5 - 2\delta^2\Omega_5 + 2\delta\epsilon\Omega_5 \approx \Omega_5(1 + 2\delta\epsilon) \end{aligned} \quad (3.35d)$$

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \gamma_s + |K_V| - |K_V|\frac{\epsilon^2}{2} \\ \gamma_2 &= \gamma_s - |K_V| + |K_V|\frac{\epsilon^2}{2} \end{aligned} \quad (3.35e)$$

Man sieht, daß in dieser Näherung die Eigenfrequenzen nur schwach von der Geschwindigkeitskopplung K_V abhängen, wie es auch in Bild 8b) ersichtlich ist. Stark ändern sich hingegen die Linienbreiten. Für $|K_V| = \gamma_s$ ist γ_1 das

doppelte der ursprünglichen Linienbreite, während γ_2 um den Faktor 10^{-4} kleiner wird.

Daraus lassen sich nun die Koeffizienten der Responsefunktionen $\chi_{aa}(\omega)$, $\chi_{bb}(\omega)$ und $\chi_{ab}(\omega)$ (Gln.(3.17), (3.18), (3.21)) berechnen. Man erhält, wenn man nach δ bzw. ϵ entwickelt und nur Terme in niederster Ordnung von δ und ϵ berücksichtigt:

$$\frac{\bar{z}_{r1}}{N} = \frac{1}{2} (1 - 2\delta) \quad \frac{\bar{z}_{r2}}{N} = -\frac{\gamma_5}{|\kappa_V|} \delta \quad \frac{\bar{z}_i}{N} = -\frac{\delta}{2|\kappa_V|} \quad (3.36a)$$

$$\frac{\bar{z}_{r1}}{N} = \frac{\gamma_5}{|\kappa_V|} \delta^2 \quad \frac{\bar{z}_{r2}}{N} = -\frac{1}{2} \operatorname{sgn} \kappa_V \quad \frac{\bar{z}_i}{N} = \frac{\delta^2 \gamma_5 \sqrt{\Omega_S}}{2 \kappa_V^2} \operatorname{sgn} \kappa_V \quad (3.36b)$$

und damit:

$$c_{aa}^1 = \frac{1}{2\omega_1} (1 - 2\delta) \quad , \quad c_{aa}^2 = \frac{1}{2\omega_2} (1 - \delta(1 - \frac{\gamma_5}{|\kappa_V|})) \quad , \quad c_{aa}^i = \frac{-\delta}{2|\kappa_V|} \quad (3.37a)$$

$$c_{bb}^1 = \frac{1}{2\omega_1} (1 + 2\delta) \quad , \quad c_{bb}^2 = \frac{1}{2\omega_2} (1 + \delta(1 - \frac{\gamma_5}{|\kappa_V|})) \quad , \quad c_{bb}^i = \frac{\delta}{2|\kappa_V|} \quad (3.37b)$$

$$c_{ab}^1 = -\frac{\operatorname{sgn} \kappa_V}{2\omega_1} (1 + \frac{\epsilon^2}{2}) \quad , \quad c_{ab}^2 = \frac{\operatorname{sgn} \kappa_V}{2\omega_2} (1 + \frac{\epsilon^2}{2}) \quad , \quad c_{ab}^i = \frac{\delta \epsilon}{2|\kappa_V|} \quad (3.37c)$$

Dies in Gl.(3.33) eingesetzt, ergibt wieder die entsprechenden Responsefunktionen. Betrachtet man diese für den Fall $\kappa_V = -\gamma_5$, so wird $\gamma_1 \approx 2\gamma_5$ und $\gamma_2 \approx 10^{-4} \gamma_5$ (s.o.), so daß für $\tau = 1/\gamma_5$ die Exponentialfaktoren in der Responsefunktion folgende Größenordnungen haben:

$$e^{-\gamma_1 \tau} \approx 0.14 \quad , \quad e^{-\gamma_2 \tau} \approx 0.9999$$

Für $\tau > 1/\gamma_5$ fällt so der Beitrag der Mode 1 rasch ab, während der der Mode 2 praktisch konstant bleibt, so daß sich die Ausdrücke für die Responsefunktionen folgendermaßen schreiben lassen:

$$\chi_{aa}(\tau > \gamma_5^{-1}) = \frac{\Theta(\tau)}{2m} e^{-\gamma_2 \tau} \left(\frac{1}{\omega_2} \sin \omega_2 \tau + \frac{\delta}{\gamma_5} \cos \omega_2 \tau \right) \quad (3.38a)$$

$$\chi_{bb}(\tau > \gamma_5^{-1}) = \frac{\Theta(\tau)}{2m} e^{-\gamma_2 \tau} \left(\frac{1}{\omega_2} \sin \omega_2 \tau - \frac{\delta}{\gamma_5} \cos \omega_2 \tau \right) \quad (3.38b)$$

$$\chi_{ab}(\tau > \gamma_5^{-1}) = \frac{\Theta(\tau)}{2m} e^{-\gamma_2 \tau} \left(\frac{-1}{\omega_2} \sin \omega_2 \tau - \frac{\epsilon^2}{2\omega_2} \sin \omega_2 \tau + \frac{\delta \epsilon}{2\gamma_5} \cos \omega_2 \tau \right) \quad (3.38c)$$

so daß bis auf Beiträge der Größenordnung $\approx 10^{-3}$ die Beträge der Responsefunktionen gleich sind. Da $e^{-\gamma_2 \tau} \approx 1$ ist, entsprechen χ_{aa} , χ_{bb} und $-\chi_{ab}$ der Responsefunktion eines ungedämpften Oszillators, obwohl im ungekoppelten System χ_{aa} und χ_{bb} gedämpft sind und für $\tau \rightarrow \infty$ verschwinden. Es ist also möglich, in einem dissipativen System Schwingungen mit nicht verschwindender Amplitude zu erzeugen, deren Lebensdauern sehr groß sind, obwohl die natürlichen Lebensdauern der Oszillatoren klein sind, so daß im ungekoppelten Zustand die Amplituden rasch gedämpft werden.

III.6 Zusammenfassung des Kapitels

Die frequenzabhängigen Responsefunktionen $\chi_{aa}(\omega)$ bzw. $\chi_{bb}(\omega)$ wurden analytisch berechnet, aus deren Fouriertransformierten die partikulären Lösungen des Bewegungsgleichungssystems Gln.(2.61) hervorgehen. Die Eigenwerte (Nullstellen) des charakteristischen Polynoms $P_{ab}(-i\omega)$ und damit die geänderten Dämpfungskonstanten $\gamma_{1/2}$ und Frequenzen $\omega_{1/2}$ wurden berechnet. Aus dem Imaginärteil der Responsefunktion $\chi_{aa}(\omega)$ wurde das Absorptionsprofil $I_{aa}(\omega)$ bestimmt, das verantwortlich ist für die Stärke der dem System von außen zugeführten Energie. Man kann dabei erkennen, daß sich das Profil aus zwei Teilen zusammensetzt, die den zwei geänderten Moden mit den Dämpfungskonstanten

$$\gamma_1 \text{ (Mode 1) , } \gamma_2 \text{ (Mode 2)}$$

und den Eigenfrequenzen

$$w_1 = \sqrt{\omega_1^2 - \gamma_1^2} \quad (\text{Mode 1}) , \quad w_2 = \sqrt{\omega_2^2 - \gamma_2^2} \quad (\text{Mode 2})$$

zugeordnet werden können. Insbesondere wurde die Abhängigkeit von der Geschwindigkeitskopplung K_v untersucht und dabei gefunden, daß für bestimmte Werte von K_v das Profil Nullstellen und Maxima mit schmalen Linienbreite haben kann, die Dämpfungseinbrüche bzw. langlebige Zustände repräsentieren. Dies soll im nächsten Kapitel eingehend diskutiert werden.

Im Anschluß daran wurden die Responsefunktionen für das System mit zwei angeregten Oszillatoren abgeleitet und daraus das Absorptionsprofil berechnet. Über die Integration der frequenzabhängigen Responsefunktion im komplexen ω -Raum wurden die zeitabhängigen Responsefunktionen bestimmt und an einigen Spezialfällen erläutert.

Es darf noch erwähnt werden, daß sich unabhängig vom Modell diese Methode dazu eignet, partikuläre Lösungen von Differentialgleichungssystemen der Form (2.61) zu berechnen.

IV.) Lösungen der Bewegungsgleichungen und Anwendung des Modells

Mit den zeitabhängigen Responsefunktionen (3.33) lassen sich nun die expliziten Lösungen (3.24) für $\langle x_a(t) \rangle$ und $\langle x_b(t) \rangle$ für spezielle äußere Kräfte formulieren. Bei maximaler Geschwindigkeitskopplung zeigt sich, daß die Erzeugung einer Gleichtaktschwingung zu Evans-Holes im Absorptionsprofil führt, während der Aufbau einer Gegentaktschwingung langlebige Zustände im Oszillatorsystem erzeugt. Es zeigt sich, daß dies ein kooperativer Effekt ist, und sich das System bei entsprechender Konfiguration wie ein Laser verhält. Bei Einstrahlung von Wellenpaketen in das System ergibt die Berechnung der absorbierten Leistung unmittelbar die (klassische) Schawlow-Townes-Bedingung [44] zur Bestimmung der Breite der Laserlinie. Außerdem kann gezeigt werden, daß das Rauschen bei der Laserfrequenz einen Minimalwert annimmt.

IV.1 Berechnung der Schwingungsgleichungen für eine δ -funktionsartige Kraft

Mit Hilfe der im vorigen Abschnitt berechneten Responsefunktionen ist es nun möglich, die Lösungen der Schwingungsgleichungen gemäß Gl.(3.24) für jede Kraft $F(t)$ zu berechnen:

$$\begin{aligned} \langle x_a(t) \rangle_{H_S} &= \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') [\chi_{aa}(t-t') + s \chi_{ab}(t-t')] \\ \langle x_b(t) \rangle_{H_S} &= \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') [\chi_{ba}(t-t') + s \chi_{bb}(t-t')] \end{aligned} \quad (4.1)$$

Speziell für eine starke Kraft, die auf das System nur kurzzeitig wirkt, die also durch den Ansatz:

$$F(t) = m v \delta(t) \quad (4.2)$$

beschrieben werden kann, läßt sich die Lösung sofort formulieren. Mit den Responsefunktionen (3.33) erhält man durch Integration:

$$\begin{aligned} \langle x_a(t) \rangle_{H_S} &= v \Theta(t) [e^{-\gamma_1 t} ((c_{aa}^1 + s c_{ab}^1) \sin w_1 t + (c_{aa}^i + s c_{ab}^i) \cos w_1 t) \\ &\quad + e^{-\gamma_2 t} ((c_{aa}^2 + s c_{ab}^2) \sin w_2 t - (c_{aa}^i + s c_{ab}^i) \cos w_2 t)] \quad (4.3a) \\ \langle x_b(t) \rangle_{H_S} &= v \Theta(t) [e^{-\gamma_1 t} ((s c_{bb}^1 + c_{ab}^1) \sin w_1 t + (s c_{bb}^i + c_{ab}^i) \cos w_1 t) \\ &\quad + e^{-\gamma_2 t} ((s c_{bb}^2 + c_{ab}^2) \sin w_2 t - (s c_{bb}^i + c_{ab}^i) \cos w_2 t)] \quad (4.3b) \end{aligned}$$

Für den kopplungsfreien Fall ($K_L=0, K_V=0$) erhält man wieder ($c_{aa}^1=1/w_1$, $c_{bb}^2=1/w_2$, $c_{ab}^2=0$ sonst):

$$\begin{aligned}\langle x_a(t) \rangle &= v \Theta(t) \frac{e^{-\gamma_a t}}{\omega_1} \sin \omega_1 t & \omega_1 &= \sqrt{\omega_a^2 - \gamma_a^2} \\ \langle x_b(t) \rangle &= sv \Theta(t) \frac{e^{-\gamma_b t}}{\omega_2} \sin \omega_2 t & \omega_2 &= \sqrt{\omega_b^2 - \gamma_b^2}\end{aligned}\quad (4.4)$$

die Lösungen für die ungekoppelten Oszillatoren. Sie sind gleich den Lösungen des homogenen Systems mit den Anfangsbedingungen

$$\langle x_a(0) \rangle = \langle x_b(0) \rangle = 0, \quad \langle \dot{x}_a(0) \rangle = v, \quad \langle \dot{x}_b(0) \rangle = sv.$$

Allgemein läßt sich auch für nichtverschwindende Kopplung die Lösung eines homogenen Anfangswertproblems auf die Lösung (4.1) der inhomogenen Bewegungsgleichungen zurückführen, wenn man für die Kraft den Ansatz:

$F(t) = m(v\delta(t) + a\frac{d}{dt}\delta(t))$ benutzt, der den Anfangsbedingungen $\langle x_a(0) \rangle = a$, $\langle x_b(0) \rangle = sa$, $\langle \dot{x}_a(0) \rangle = v$ und $\langle \dot{x}_b(0) \rangle = sv$ entspricht.

Für den Fall $\Omega_d = 0$, $K_L = 0$ erhält man wieder die Lösungen mit Hilfe von III.5 ii). Mit den Abkürzungen für die Schwingungsmoden 1 und 2:

$$x_{1/2}(t) = \frac{1}{\omega_{1/2}} e^{-\gamma_{1/2} t} \sin \omega_{1/2} t \quad (4.5)$$

erhält man:

$$\langle x_a(t) \rangle = \frac{1}{2} v \left[x_1(t) \left(1 + \frac{\gamma_a - s\gamma_v}{\sqrt{\gamma_a^2 + \gamma_v^2}} \right) + x_2(t) \left(1 - \frac{\gamma_a - s\gamma_v}{\sqrt{\gamma_a^2 + \gamma_v^2}} \right) \right] \quad (4.6a)$$

$$\langle x_b(t) \rangle = \frac{1}{2} v \left[x_1(t) \left(1 - \frac{\gamma_a + \gamma_v/s}{\sqrt{\gamma_a^2 + \gamma_v^2}} \right) + x_2(t) \left(1 + \frac{\gamma_a + \gamma_v/s}{\sqrt{\gamma_a^2 + \gamma_v^2}} \right) \right] \quad (4.6b)$$

Betrachtet man nun diese Lösungen für den Grenzwert der Geschwindigkeitskopplung $K_v = -\sqrt{\gamma_a \gamma_b} = -\sqrt{\gamma_s^2 - \gamma_a^2}$, erhält man

$$\gamma_1 = 2\gamma_s, \quad \gamma_2 = 0, \quad \omega_1 = \sqrt{\omega_a^2 - 4\gamma_s^2}, \quad \omega_2 = \omega_a$$

Damit fällt die Mode 1 mit der Relaxationszeit $\tau = (\gamma_a + \gamma_b)^{-1}$ ab, also schneller als der ungestörte Oszillator. Die Mode 2 dagegen hat eine unendliche Lebensdauer, so daß das Langzeitverhalten des Systems allein durch sie bestimmt wird. Man erhält also für Zeiten $t > (\gamma_a + \gamma_b)^{-1}$

$$\langle x_a(t) \rangle \approx \frac{1}{2} v \left(1 - \gamma_a/\gamma_s - s\sqrt{1 - \gamma_a^2/\gamma_s^2} \right) \frac{\sin \omega_a t}{\omega_a} \quad (4.7a)$$

$$\langle x_b(t) \rangle \approx \frac{1}{2} v \left(s(1 + \gamma_a/\gamma_s) - \sqrt{1 - \gamma_a^2/\gamma_s^2} \right) \frac{\sin \omega_a t}{\omega_a} \quad (4.7b)$$

Nimmt man ferner an, daß sich die Lebensdauern der ungekoppelten Schwingungen nicht stark unterscheiden, so daß $\gamma_a^2/\gamma_s^2 \ll 1$ gilt, erhält man schließlich:

$$\langle x_a(t) \rangle = \frac{1}{2} v (1 - s - \gamma_a/\gamma_s) \frac{\sin \omega_a t}{\omega_a} \quad (4.8a)$$

$$\langle x_b(t) \rangle = \frac{1}{2} v (1-s + s \gamma_d / \gamma_s) \frac{\sin \omega_a t}{\omega_a} \quad (4.8b)$$

Man sieht nun, daß die "Gleichtaktschwingung"

$$\langle x_a(t) \rangle + \langle x_b(t) \rangle = \frac{1}{2} v (1+s) \frac{\gamma_d}{\gamma_s} \frac{\sin \omega_a t}{\omega_a} \quad (4.10a)$$

gegenüber der "Gegentaktschwingung":

$$\langle x_a(t) \rangle - \langle x_b(t) \rangle = v (1-s - \frac{\gamma_d}{2\gamma_s} (1-s)) \frac{\sin \omega_a t}{\omega_a} \quad (4.10b)$$

für $s=0$, wenn also nur die Mode "a" angeregt wird, eine Amplitude besitzt, die um den Faktor γ_d/γ_s kleiner ist als die der Gegenteiltschwingung.

Werden beide Moden in gleicher Richtung angeregt ($s=1$), bleibt nur die Gleichtaktschwingung mit der Amplitude $v \gamma_d / (\omega_a \gamma_s)$ erhalten, die Gegenteiltschwingung verschwindet.

Regt man beide Moden in entgegengesetzter Richtung an ($s=-1$), verschwindet die Gleichtaktschwingung, es bleibt die Gegenteiltschwingung mit der Amplitude $2v / \omega_a$. Betrachtet man die Energie

$$E_K(t) = \frac{1}{2} m [\omega_a^2 (\langle x_a(t) \rangle^2 + \langle x_b(t) \rangle^2) + \langle \dot{x}_a(t) \rangle^2 + \langle \dot{x}_b(t) \rangle^2]$$

die zur Zeit t im Oszillatorsystem steckt, im Vergleich zur eingestrahnten Energie E_0 von Gl.(3.25), erhält man

	$s = 0$	$s = -1$	$s = +1$
E_0	$\frac{1}{2} m v^2$ im gekoppelten System ($K_V = -\sqrt{\gamma_a \gamma_b}$) für $t \gg (\gamma_a + \gamma_b)^{-1}$:	$m v^2$	$m v^2$
$E_K(t)$	$\frac{1}{4} m v^2 (1 - \frac{\gamma_d}{\gamma_s})$	$m v^2 (1 - \frac{\gamma_d}{\gamma_s})$	$\frac{1}{4} m v^2 \frac{\gamma_d^2}{\gamma_s^2}$

Das Verhältnis der Energien $E_K(t)/E_0$ wird dann in einer groben Abschätzung

$$E_K(t)/E_0 (s=0) \approx 1/2, \quad E_K(t)/E_0 (s=1) = \gamma_d^2 / (4 \gamma_s^2), \quad E_K(t)/E_0 (s=-1) \approx 1$$

Dies bedeutet, daß für ein System, in dem nur eine Mode angeregt wird, etwa die Hälfte der eingestrahnten Energie in der langlebigen Mode 2 enthalten ist, der Rest wird über die Mode 1 dissipiert. Für $s=1$, wo beide Oszillatoren in gleicher Richtung angeregt werden, verbleibt nur ein geringer Teil der Energie in der Mode 2, der weitaus größte Anteil wird dissipiert. Für den Fall $s=-1$, bei dem die Gegenteiltschwingung das Langzeitverhalten bestimmt, wird nur ein sehr geringer Anteil der

eingestrahelten Energie dissipiert, nahezu die gesamte Energie steckt in der langlebigen Mode 2. Um also langlebige Oszillationen des Systems mit hohem Energieinhalt zu erzeugen, ist es zweckmäßig, beide Moden so anzuregen, daß sie im Gegentakt schwingen. Eine zweite Möglichkeit zur Erzeugung einer langlebigen Oszillation mit relativ hohem Energieinhalt ist die Anregung nur einer Mode des Systems.

Die ausführliche Behandlung dieses relativ einfachen Beispiels sollte zeigen, wie durch den Einfluß der Geschwindigkeitskopplung langlebige Moden erzeugt werden können. Die oben beschriebenen Eigenschaften bleiben auch dann erhalten, wenn die Oszillatoren nicht exakt gleiche Eigenfrequenzen haben, sondern leicht verstimmt sind. Die Lebensdauer der Mode 2 ist dann allerdings endlich, sie ist jedoch in Abhängigkeit von der Differenz der Eigenfrequenzen um Zehnerpotenzen höher als die der ungekoppelten Oszillatorzustände.

Nimmt man wieder das Beispiel für Oszillatoren mit $K_L=0$, $\chi_d=0$, $\omega_{a,b} = \omega_s(1 \pm \delta)$ (siehe III.5 iii)) mit der Geschwindigkeitskopplung $K_V = \chi_s \operatorname{sgn} K_V$, so lassen sich bei den Zahlenwerten, wie sie in III.5 iii) angenommen wurden, Glieder mit ε^2 und $\delta\varepsilon$ gegenüber δ vernachlässigen und man erhält für die Koeffizienten $c_{\beta\gamma}^k$ aus Gl.(3.37):

$$\begin{aligned} c_{aa}^1 + s c_{ab}^1 &= \frac{1}{2\omega_1} (1 - 2\delta - s \operatorname{sgn} K_V) , & c_{aa}^2 + s c_{ab}^2 &= \frac{1}{2\omega_2} (1 + s \operatorname{sgn} K_V) \\ s c_{bb}^1 + c_{ab}^1 &= \frac{1}{2\omega_1} (s (1 + 2\delta) - \operatorname{sgn} K_V) , & s c_{bb}^2 + c_{ab}^2 &= \frac{1}{2\omega_2} (s + \operatorname{sgn} K_V) \\ c_{aa}^i + s c_{ab}^i &= -\delta/2\chi_s , & s c_{bb}^i + c_{ab}^i &= s\delta/2\chi_s \end{aligned} \quad (4.11)$$

Die Lösungen der Schwingungsgleichungen lassen sich wieder nach Gl.(4.3) berechnen. Man sieht, daß ihre Form von der Wahl des Vorzeichens sowohl von s als auch von K_V abhängt. Da für dieses Modell K_V nur negative Werte annehmen kann, genügt es wieder, die Fälle $s=0, \pm 1$ zu betrachten. Da für die Linienbreiten $\chi_1 \gg \chi_2$ gilt (siehe III.5 iii)), kann man für Zeiten $t > 1/\chi_1$ wieder die Beiträge der Mode 1 vernachlässigen. Somit erhält man für $t > 1/\chi_1$, $\operatorname{sgn} K_V = -1$ die Gegentakt- und Gleichtaktsschwingung

	$\langle x_a(t) \rangle - \langle x_b(t) \rangle$	$\langle x_a(t) \rangle + \langle x_b(t) \rangle$
$s = 0$	$v e^{-\gamma_2 t} \left(\frac{\sin \omega_1 t}{\omega_2} + \frac{\delta}{2\chi_s} \cos \omega_2 t \right)$	$v e^{-\gamma_2 t} \frac{\delta}{2\chi_s} \cos \omega_2 t$
$s = 1$	$v e^{-\gamma_2 t} \frac{\delta}{\chi_s} \cos \omega_2 t$	$2v e^{-2\gamma_2 t} (1 - \delta) \frac{\sin \omega_1 t}{\omega_1} \rightarrow 0$
$s = -1$	$2v e^{-\gamma_2 t} \frac{\sin \omega_2 t}{\omega_2}$	$v \frac{\delta}{\chi_s} e^{-\gamma_2 t} \cos \omega_2 t$

Man sieht, daß auch in diesem Fall praktisch die gesamte Energie in der Gegentaktschwingung enthalten ist, wenn beide Oszillatoren entgegengesetzt angeregt werden ($s=-1$). Für gleichsinnige Anregung ($s=1$) wandert die Energie hauptsächlich in die Gleichtaktschwingung und wird dort dissipiert. Für das einfach angeregte System ($s=0$) entsteht eine Gegentaktschwingung, die im Vergleich zur Schwingung mit $s=-1$ etwa die halbe Amplitude hat und um $\varphi \approx \delta\omega_2/2\chi_s$ phasenverschoben ist. Dies bedeutet wieder, daß etwa die Hälfte der zugeführten Energie über die Gleichtaktmode dissipiert wird.

IV.2 Berechnung der Schwingungsgleichungen für eine periodische Kraft

Eine häufig angewandte Möglichkeit zur Anregung eines Oszillator-systems ist die Einstrahlung einer periodischen Kraft

$$F(t) = \frac{1}{2} m a (e^{i\bar{\omega}t} + e^{-i\bar{\omega}t}) \quad (4.12)$$

wobei die Einstrahlungszeit so lange dauern soll, daß Einschwingvorgänge im Oszillatorsystem nicht berücksichtigt werden müssen. Durch Einsetzen in (4.1) lassen sich die Lösungen $\langle x_a(t) \rangle$ und $\langle x_b(t) \rangle$ berechnen. Der einfachere Weg führt jedoch über die Ausnutzung des Faltungstheorems. Damit erhält man

$$\langle x_a(t) \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} F(\omega) [\chi_{aa}(\omega) + s \chi_{ab}(\omega)] e^{i\omega t} \quad (4.13a)$$

$$\langle x_b(t) \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} F(\omega) [s \chi_{bb}(\omega) + \chi_{ba}(\omega)] e^{i\omega t} \quad (4.13b)$$

und mit $F(\omega) = m a \pi (\delta(\omega + \bar{\omega}) + \delta(\omega - \bar{\omega}))$ und der Symmetrierelation

$$\chi_{\beta\gamma}^*(\omega) = \chi_{\beta\gamma}(-\omega)$$

nach (3.17), (3.18) und (3.21) folgende Ausdrücke

$$\langle x_a(t) \rangle = m a [(\chi'_{aa}(\bar{\omega}) + s \chi'_{ab}(\bar{\omega})) \cos \bar{\omega} t + (\chi''_{aa}(\bar{\omega}) + s \chi''_{ab}(\bar{\omega})) \sin \bar{\omega} t] \quad (4.14a)$$

$$\langle x_b(t) \rangle = m a [(s \chi'_{bb}(\bar{\omega}) + \chi'_{ab}(\bar{\omega})) \cos \bar{\omega} t + (s \chi''_{bb}(\bar{\omega}) + \chi''_{ab}(\bar{\omega})) \sin \bar{\omega} t] \quad (4.14b)$$

Das Verhalten der Oszillatoren wird durch die frequenzabhängigen Responsefunktionen bestimmt. Die pro Periode eingestrahlte mittlere Leistung ist nach Gl.(2.82) bzw. Gl.(3.25):

$$\begin{aligned} \bar{N} &= \frac{1}{2} m^2 a^2 \bar{\omega} [\chi''_{aa}(\bar{\omega}) + 2s \chi''_{ab}(\bar{\omega}) + s^2 \chi''_{bb}(\bar{\omega})] \\ &= \frac{1}{2} m^2 a^2 \bar{\omega}^2 \hat{I}(\bar{\omega}) \end{aligned} \quad (4.15)$$

wobei $\hat{I}(\bar{\omega})$ wieder die Intensität von Gl.(3.27) ist.

Zur weiteren Behandlung soll das Beispiel verwendet werden, bei dem die Oszillatoren leicht verstimmt sind und gleiche Linienbreiten haben. Ihre Kopplung soll nur über den Geschwindigkeitsterm stattfinden. Damit lassen sich wieder die Beziehungen Gln.(3.34) - (3.36) verwenden. Mit $K_L=0$, $\gamma_a=0$, $\omega_{a/b}=\omega_s(1\pm\delta)$ erhält man die veränderten Linienbreiten und Frequenzen der beiden Moden:

$$\text{Mode 1 : } \gamma_1 = \gamma_s + |K_V| - |K_V| \varepsilon^2/2, \quad \omega_1^2 = \omega_s^2 (1 - 2\delta\varepsilon)$$

$$\text{Mode 2 : } \gamma_2 = \gamma_s - |K_V| + |K_V| \varepsilon^2/2, \quad \omega_2^2 = \omega_s^2 (1 + 2\delta\varepsilon)$$

$$(\varepsilon^2 = \delta^2 \omega_s^2 / K_V^2 \approx 0.3 \text{ für } |K_V| \geq 0.3 \gamma_s)$$

und die Responsefunktionen ($\text{sgn } K_V = -1$, $\chi'_{1/2}$ und $\chi''_{1/2}$ aus (3.16)):

$$\begin{aligned} \chi'_{aa/bb}(\omega) &= \frac{1}{2} (1 \mp 2\delta (1 + \frac{\gamma_s}{|K_V|})) \chi'_1(\omega) \mp \frac{\delta}{2|K_V|} \omega \chi''_1(\omega) \\ &\quad + \frac{1}{2} (1 \mp 2\delta (1 - \frac{\gamma_s}{|K_V|})) \chi'_2(\omega) \pm \frac{\delta}{2|K_V|} \omega \chi''_2(\omega) \quad (4.16a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi''_{aa/bb}(\omega) &= \frac{1}{2} (1 \mp 2\delta (1 + \frac{\gamma_s}{|K_V|})) \chi''_1(\omega) \pm \frac{\delta}{2|K_V|} \omega \chi'_1(\omega) \\ &\quad + \frac{1}{2} (1 \mp 2\delta (1 - \frac{\gamma_s}{|K_V|})) \chi''_2(\omega) \mp \frac{\delta}{2|K_V|} \omega \chi'_2(\omega) \quad (4.16b) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi'_{ab}(\omega) &= \frac{1}{2} (1 + \frac{\varepsilon^2}{2}) \chi'_1(\omega) - \frac{\varepsilon^2}{2\sqrt{\Omega_s}} \omega \chi''_1(\omega) \\ &\quad - \frac{1}{2} (1 + \frac{\varepsilon^2}{2}) \chi'_2(\omega) + \frac{\varepsilon^2}{2\sqrt{\Omega_s}} \omega \chi''_2(\omega) \quad (4.16c) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi''_{ab}(\omega) &= \frac{1}{2} (1 + \frac{\varepsilon^2}{2}) \chi''_1(\omega) + \frac{\varepsilon^2}{2\sqrt{\Omega_s}} \omega \chi'_1(\omega) \\ &\quad - \frac{1}{2} (1 + \frac{\varepsilon^2}{2}) \chi''_2(\omega) - \frac{\varepsilon^2}{2\sqrt{\Omega_s}} \omega \chi'_2(\omega) \quad (4.16d) \end{aligned}$$

Die Phasen der Oszillatoren relativ zur eingestrahlten Welle werden durch die Winkel

$$\varphi_a = \arctan \frac{\chi''_{aa}(\omega) + s \chi''_{ab}(\omega)}{\chi'_{aa}(\omega) + s \chi'_{ab}(\omega)} \quad \varphi_b = \arctan \frac{\chi''_{bb}(\omega) + s \chi''_{ba}(\omega)}{\chi'_{bb}(\omega) + s \chi'_{ba}(\omega)} \quad (4.17)$$

bestimmt. In den Bildern 17-21 sind die Absorptionsprofile $\hat{I}_{aa}(\omega)$, $\hat{I}_{bb}(\omega)$, $\hat{I}_{ab}(\omega)$ und die dispersiven Responen für verschiedene K_V aufgezeichnet. Folgende Werte wurden dabei benutzt.

$$\omega_a = 1001 \text{ sec}^{-1}, \omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}, \gamma_a = \gamma_b = \gamma_s = 100 \text{ sec}^{-1}, K_V = 0, -30, -70 \text{ sec}^{-1}$$

Dabei läßt sich folgendes Verhalten ablesen:

Für $K_V = 0$ ist

$$\chi'_{aa}(\omega) = \chi'_1(\omega), \quad \chi'_{bb}(\omega) = \chi'_2(\omega), \quad \chi'_{ab}(\omega) = 0$$

$$\chi''_{aa}(\omega) = \chi''_1(\omega), \quad \chi''_{bb}(\omega) = \chi''_2(\omega), \quad \chi''_{ab}(\omega) = 0$$

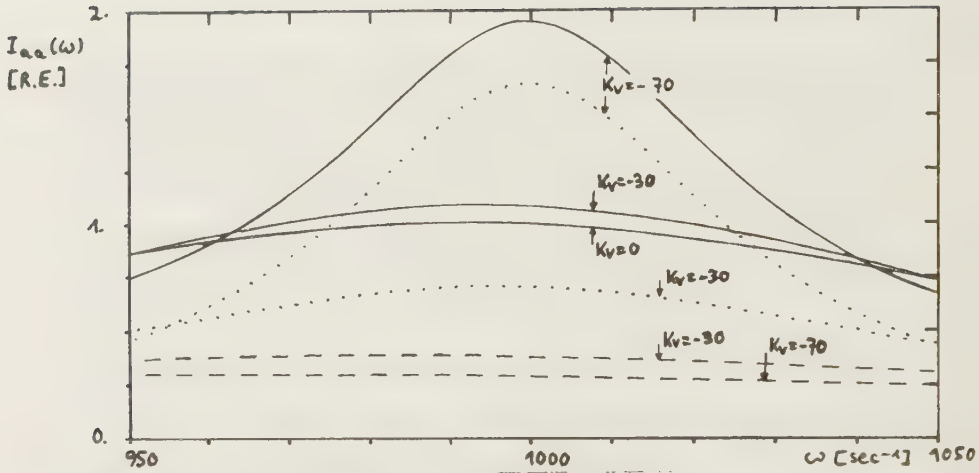


Bild 17: Absorptionsprofil $I_{aa}(\omega)$ bzw. $I_{bb}(\omega)$ (—) für $K_V = 0, -30, -70 \text{ sec}^{-1}$
 Anteil Mode 1: - - - Anteil Mode 2:
 (I_{aa} und I_{bb} unterscheiden sich um weniger als die Strichdicke)
 $\omega_a = 1001 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_a = \gamma_b = 100 \text{ sec}^{-1}$

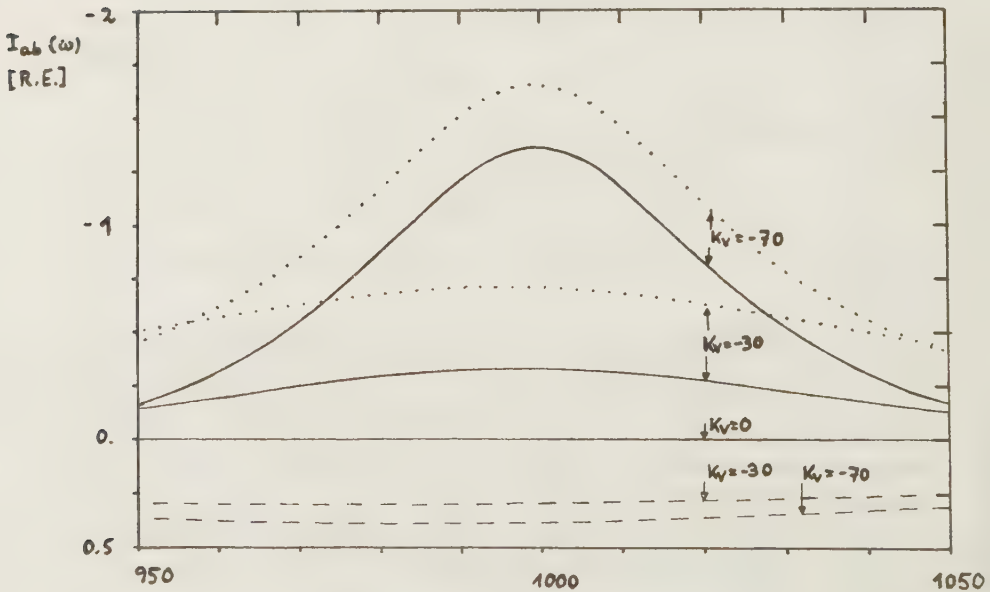


Bild 18: Absorptionsprofil $I_{ab}(\omega)$ (—) für $K_V = 0, -30, -70 \text{ sec}^{-1}$
 Anteil Mode 1: - - - Anteil Mode 2:
 $\omega_a = 1001 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_a = \gamma_b = 100 \text{ sec}^{-1}$

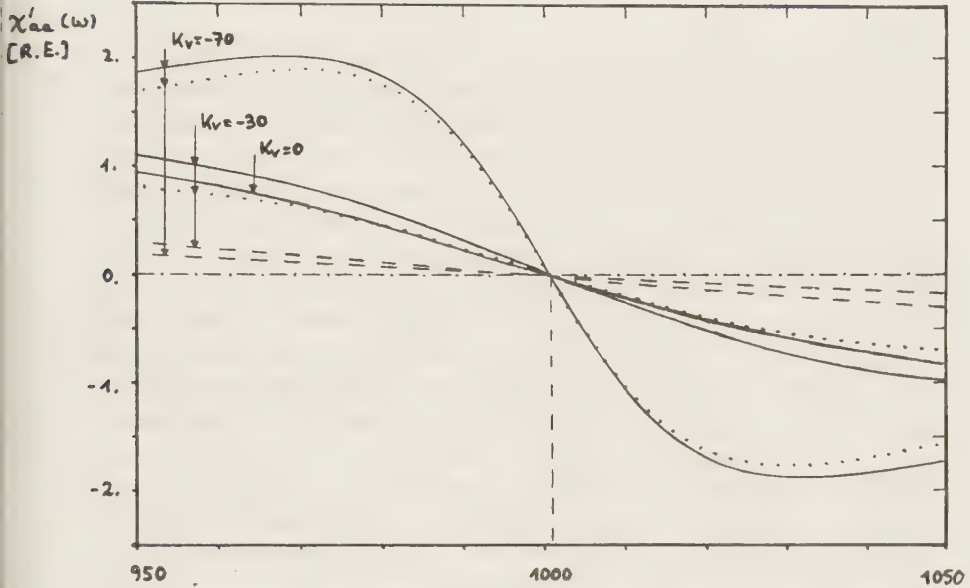


Bild 19: Dispersive Responsefunktion $\chi'_{aa}(\omega)$ (—) für $K_v=0, -30, -70 \text{ sec}^{-1}$ $\omega [\text{sec}^{-1}]$

Anteil Mode 1: - - - Anteil Mode 2:

$\omega_a = 1001 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_a = \gamma_b = 100 \text{ sec}^{-1}$

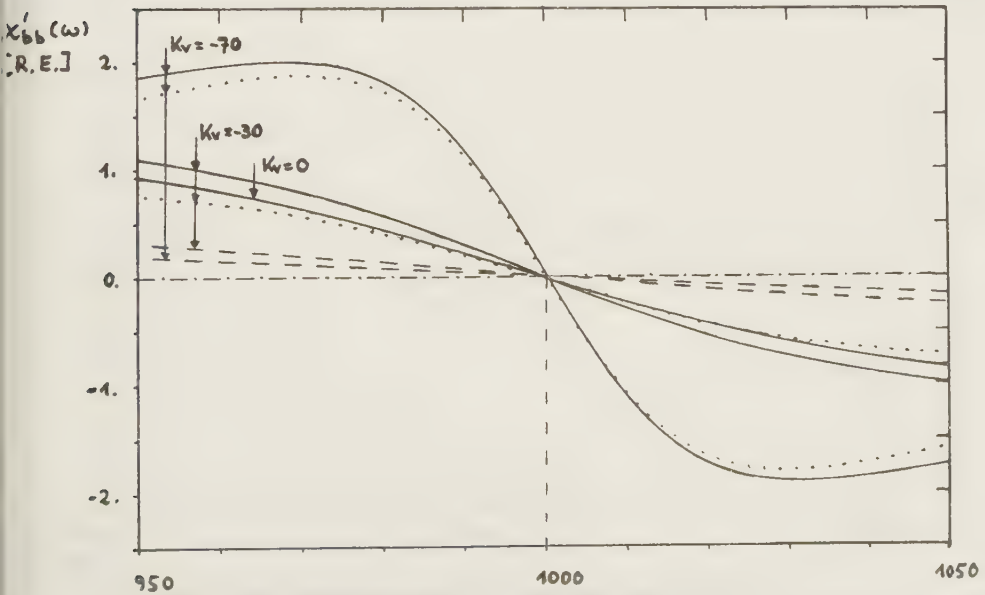


Bild 20: Dispersive Responsefunktion $\chi'_{bb}(\omega)$ (—) für $K_v=0, -30, -70 \text{ sec}^{-1}$ $\omega [\text{sec}^{-1}]$

Anteil Mode 1: - - - Anteil Mode 2:

$\omega_a = 1001 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_a = \gamma_b = 100 \text{ sec}^{-1}$

Damit hat nun für $\omega = \omega_a$ die dispersive Response eine Nullstelle, und die absorbierte Leistung der Mode "a" ist maximal. Dies gilt entsprechend für die Mode "b" bei $\omega = \omega_b$. Bei Einsetzen der Kopplung sieht man schon bei $K = -30 \text{ sec}^{-1}$, daß überwiegend die Mode 2 das Verhalten sowohl der Absorptionsprofile als auch der dispersiven Responsefunktionen bestimmt. Die Mode 1 gibt in $\hat{I}_{aa}(\omega)$ und $\hat{I}_{bb}(\omega)$ einen Beitrag, der nur schwach frequenzabhängig ist, und dessen Maximum ungefähr gegen ein Viertel des Maximums des ungestörten Profils $\hat{I}_{aa}^{\text{max}} \approx (2 \gamma_a \Omega_a)^{-1}$ strebt. Für $\hat{I}_{ab}(\omega)$ geht der Beitrag der Mode 2 zu negativen Werten, während die Mode 1 sich in etwa verhält wie in $\hat{I}_{aa}(\omega)$ bzw. $\hat{I}_{bb}(\omega)$. Der Beitrag der Mode 1 in den dispersiven Responsefunktionen verschwindet mit zunehmender Kopplungsstärke. Im Grenzfall $K_V = -100 \text{ sec}^{-1}$ erhält man die Absorptionsprofile von Bild 22-25. In $\hat{I}_{aa}(\omega)$ hat der Beitrag der Mode 2 einen negativen Wert für $\omega < \omega_b$, verursacht durch den Anteil von $\chi'_{1/2}(\omega)$ (Gl.(4.16b)). Dieser hat sein Minimum an der Stelle $\omega = \omega_b$, dessen Wert sich mit dem der Mode 1 zu Null ergänzt, so daß also gilt

$$\hat{I}_{aa}(\omega_b) = 0.$$

Bei Zunahme der Frequenz wächst der Beitrag von $\chi''_a(\omega)$ rasch an, so daß

$\chi'_{ab}(\omega)$
[R.E.] 2.

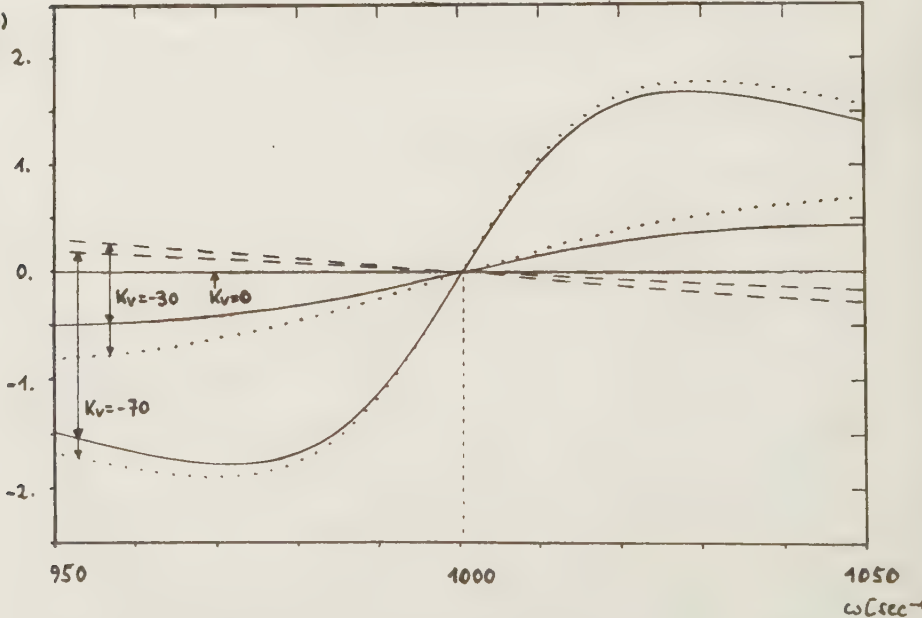


Bild 21: Dispersive Responsefunktion $\chi'_{ab}(\omega)$ (—) für $K_V = 0, -30, -70 \text{ sec}^{-1}$

Anteil Mode 1: - - - Anteil Mode 2:

$\omega_a = 1001 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_a = \gamma_b = 100 \text{ sec}^{-1}$

man im Profil ein sehr scharfes Maximum hat. Aus dem Leistungsprofil (4.15) läßt sich errechnen, daß dieses Maximum sich an der Stelle $\omega = \omega_2 \approx \Omega_2$ befindet und eine Halbwertsbreite $2\gamma_2$ besitzt. Bei weiterem Anwachsen der Frequenz fällt $\hat{I}_{aa}(\omega)$ rasch ab, wobei die rechte Flanke noch durch den Beitrag der dispersiven Response $\chi'_2(\omega)$ (4.16a) aufgeweitet wird. Das entsprechende Verhalten gilt für $\hat{I}_{bb}(\omega)$, nur ist nun die Nullstelle bei ω_a und der Frequenzgang läuft seitenverkehrt (Bilder 22,23). Da in $\hat{I}_{ab}(\omega)$ der Beitrag von $\chi'_2(\omega)$ nach Gl.(4.16d) um etwa eine Größenordnung von δ kleiner ist als die vergleichbaren Beiträge zu $\hat{I}_{aa}(\omega)$ bzw. $\hat{I}_{bb}(\omega)$, bestimmt nur $\chi''_2(\omega)$ das Verhalten von $\hat{I}_{ab}(\omega)$. Es ergibt sich ein negativer Beitrag mit dem Maximum wiederum bei $\omega = \omega_2$, der sich an den Stellen $\omega = \omega_a, \omega_b$ mit den übrigen Anteilen von $\hat{I}_{ab}(\omega)$ zu Null ergänzt (Bild 24), so daß gilt:

$$\hat{I}_{ab}(\omega_a) = \hat{I}_{ab}(\omega_b) = 0$$

Das Verhalten der Teilprofile im Bereich des Maximums ist in Bild 25 dargestellt.

Der Frequenzgang der dispersiven Responsefunktionen $\chi'_{aa}(\omega)$, $\chi'_{bb}(\omega)$ und $\chi'_{ab}(\omega)$ für $K_V = -100 \text{ sec}^{-1}$ in der Nähe von ω_2 ist in Bild 26 dargestellt. Die Mode 1 liefert für alle drei Responsefunktionen keinen Beitrag mehr, so

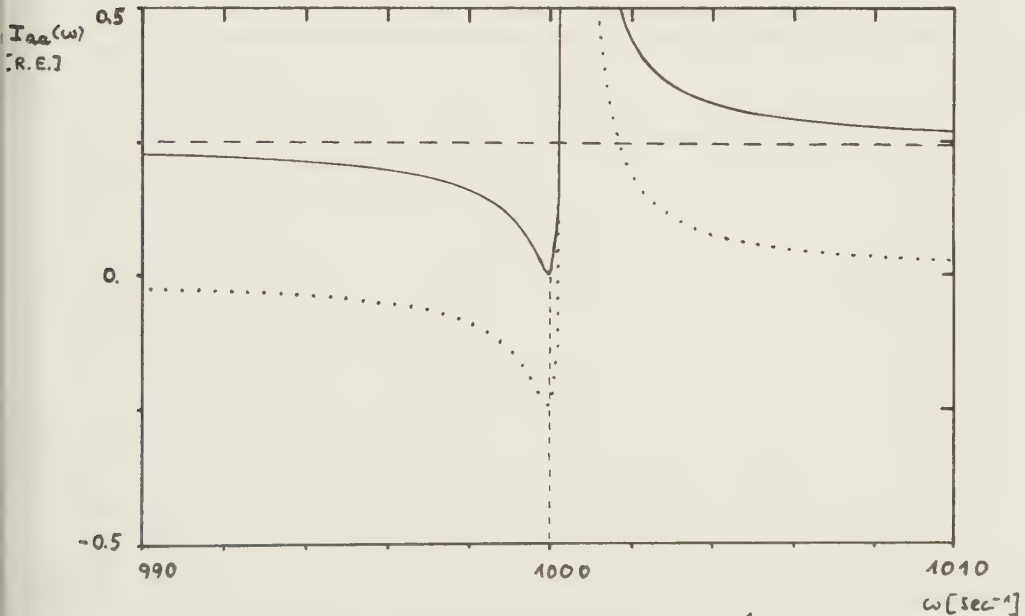


Bild 22: Absorptionsprofil $I_{aa}(\omega)$ (—) für $K_V = -100 \text{ sec}^{-1}$

Anteil Mode 1: - - - Anteil Mode 2:

$$\omega_a = 1001 \text{ sec}^{-1}, \omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}, \gamma_a = \gamma_b = 100 \text{ sec}^{-1}$$

daß wieder die Mode 2 das Verhalten bestimmt. Dabei zeigen $\chi'_{aa}(\omega)$ und $\chi'_{bb}(\omega)$ praktisch ein identisches Verhalten. Der Anteil von $\chi''_2(\omega)$ in Gl.(4.16a) sorgt dafür, daß die Nullstelle von $\chi'_{aa}(\omega)$ etwas nach rechts von ω_2 verschoben wird, während die Nullstelle von $\chi'_{bb}(\omega)$ sich links von ω_2 befindet, was allerdings im Bild nicht sichtbar gemacht werden kann. Ebenso ergeben sich Unterschiede in der relativen Höhe der Maxima bzw. Minima. Die Responsefunktion $\chi'_{ab}(\omega)$ hat gegenüber $\chi'_{aa}(\omega)$ bzw. $\chi'_{bb}(\omega)$ das umgekehrte Vorzeichen, ihre Nullstelle wird durch den Einfluß von $\chi''_2(\omega)$ (Gl.(4.16c)) nach links von ω_2 verschoben und ist exakt bei $\omega = \sqrt{\omega_2^2 + \omega_3^2}/2$:

$$\chi'_{ab}(\sqrt{\omega_2^2 + \omega_3^2}) = 0$$

Mit den Responsefunktionen (4.16) ist das Verhalten der Oszillatoren, vor allem ihre Absorption und die Phasenbeziehung (4.17), grundsätzlich bekannt. Von Interesse ist dabei vor allem das simultane Auftreten von Nullstellen und scharfen Maxima in den Absorptionsprofilen bei maximaler Kopplung $K_V = -\gamma_5$. Diese Eigenschaften des Oszillatorsystems sollen in den nächsten zwei Abschnitten diskutiert werden.

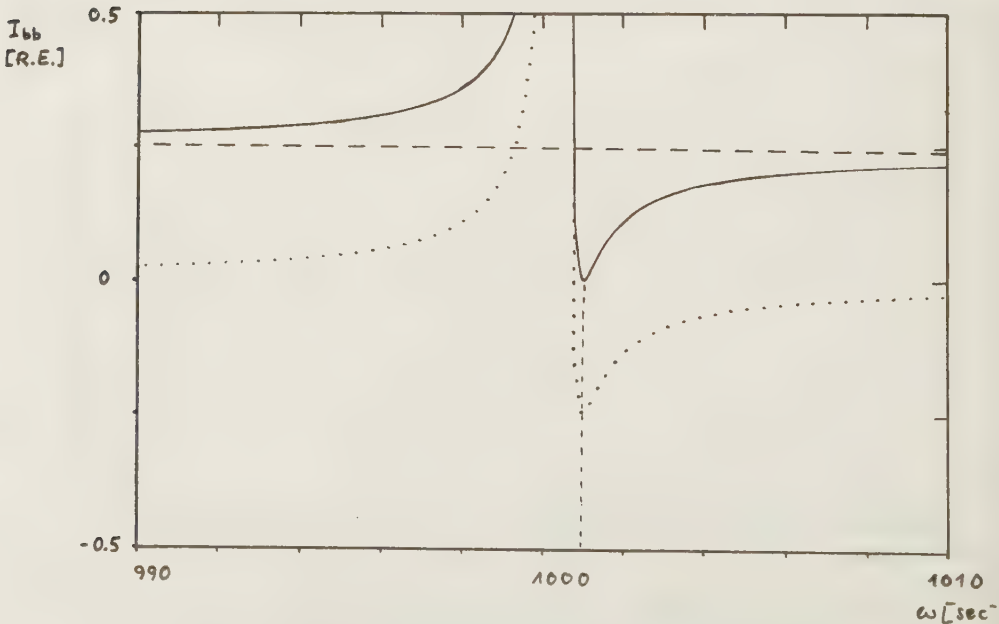


Bild 23: Absorptionsprofil $I_{bb}(\omega)$ (—) für $K_V = -100 \text{ sec}^{-1}$

Anteil Mode 1: - - - Anteil Mode 2:

$\omega_a = 1001 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_a = \gamma_b = 100 \text{ sec}^{-1}$

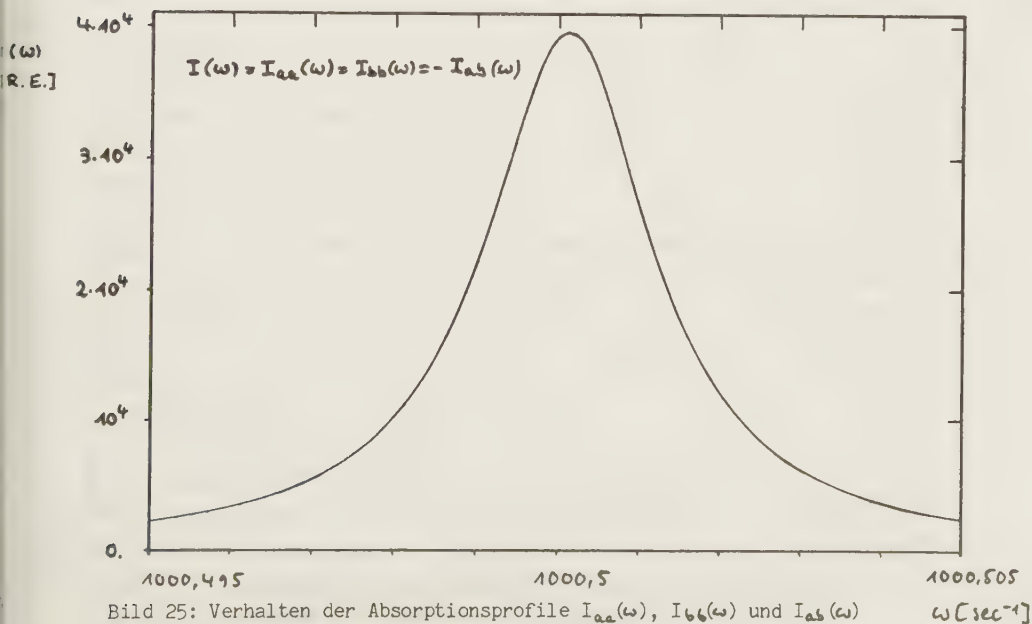
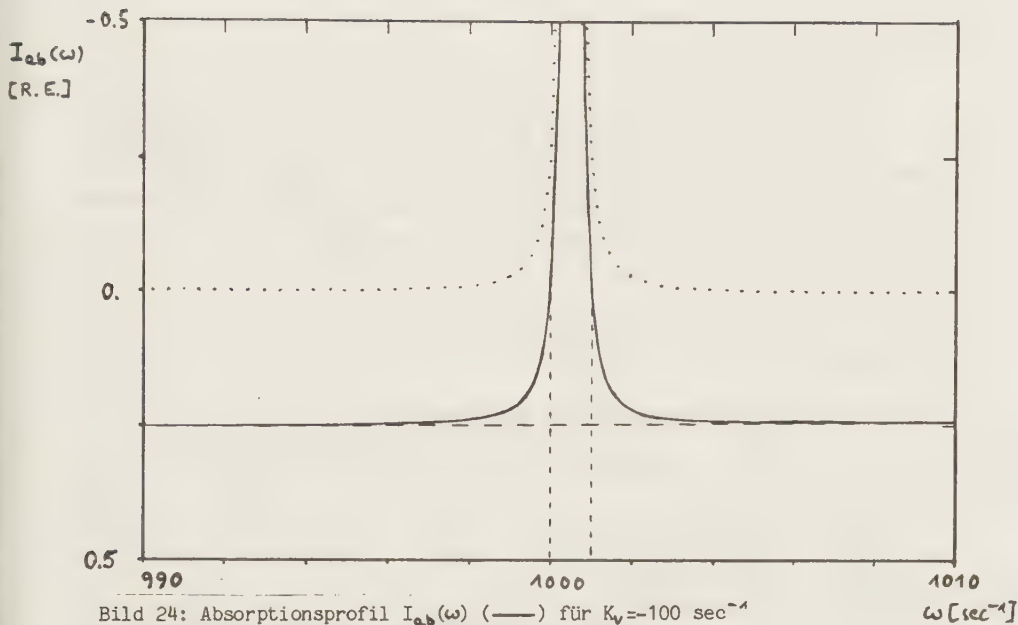


Bild 25: Verhalten der Absorptionsprofile $I_{aa}(\omega)$, $I_{bb}(\omega)$ und $I_{ab}(\omega)$

in der Nähe des Maximums für $K_v = -100 \text{ sec}^{-1}$

Werte wie in Bild 24

IV.3 Dämpfungseinbrüche

Im vorigen Abschnitt und auch in Kapitel III wurde darauf hingewiesen, daß im Absorptionsprofil gekoppelter Oszillatoren Nullstellen auftreten können, und damit an diesen Stellen vom Oszillatorsystem keine Energie aufgenommen wird. Betrachtet man ein System, in dem nur die Mode "a" von einer äußeren Kraft angeregt wird, erhält man die Lösungen $\langle x_a(t) \rangle$ und $\langle x_b(t) \rangle$ von Gl.(4.14) mit $s=0$:

$$\langle x_a(t) \rangle = m a (\chi'_{aa}(\bar{\omega}) \cos \bar{\omega} t + \chi''_{aa}(\bar{\omega}) \sin \bar{\omega} t) \quad (4.18a)$$

$$\langle x_b(t) \rangle = m a (\chi'_{ab}(\bar{\omega}) \cos \bar{\omega} t + \chi''_{ab}(\bar{\omega}) \sin \bar{\omega} t) \quad (4.18b)$$

wobei die pro Periode aufgenommene mittlere Leistung nach Gl.(4.15)

$$\bar{N} = \frac{1}{2} m^2 a^2 \bar{\omega}^2 \frac{\chi''_{aa}(\bar{\omega})}{\bar{\omega}} \quad (4.19a)$$

beträgt, somit die Intensität

$$\hat{I}_{aa}(\bar{\omega}) = \chi''_{aa}(\bar{\omega}) / \bar{\omega} \quad (4.19b)$$

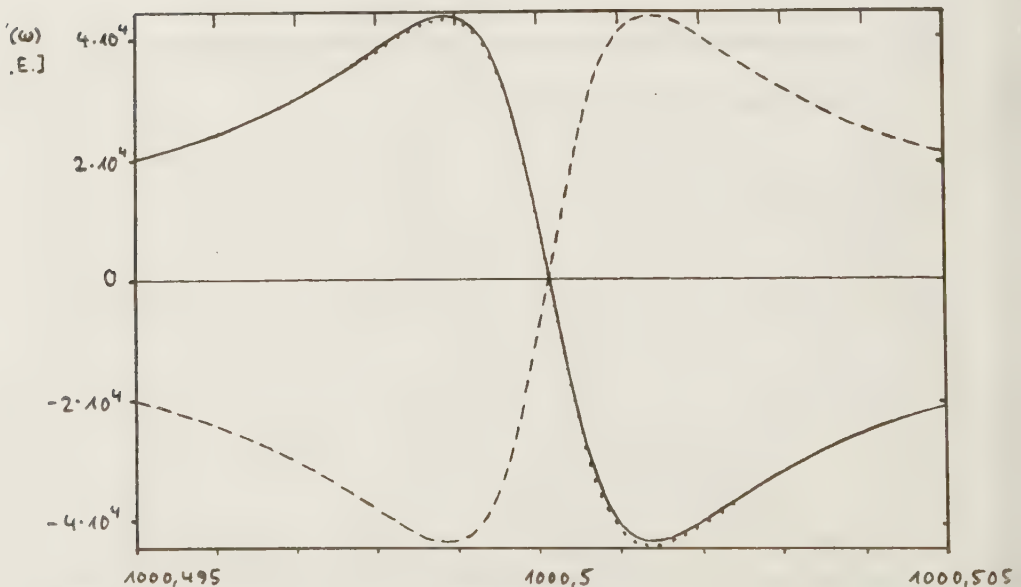


Bild 26: Verhalten der reflexiven Responsefunktionen $\chi'_{aa}(\omega)$ (—), $\chi'_{bb}(\omega)$ (....) und $\chi'_{ab}(\omega)$ (- - -) für $K_V = -100 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_a = 1001 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}$, $\gamma_a = \gamma_b = 100 \text{ sec}^{-1}$

das Absorptionsverhalten des Oszillatorsystems bestimmt. Betrachtet man nun den Zähler $\hat{I}_{aa2}(\bar{\omega})$ von $\hat{I}_{aa}(\bar{\omega})$ (siehe Gl.(3.14b)):

$$\begin{aligned} \hat{I}_{aa2}(\bar{\omega}) = & 2\gamma_a (\bar{\omega}^2 - \omega_b^2 - K_L^2)^2 + 4(\bar{\omega}^2 - \omega_b^2 - K_L^2)(K_V K_L^2 + 2\gamma_b (\gamma_a \gamma_b - K_V^2)) \\ & + 2\gamma_b (4(\omega_b^2 + K_L^2)(\gamma_a \gamma_b - K_V^2) + K_L^4) \end{aligned} \quad (4.20)$$

ergeben sich die Nullstellen von $\hat{I}_{aa2}(\bar{\omega})$ bei:

$$\omega_E^2 = \omega_b^2 + K_L^2 - \frac{1}{\gamma_a} (K_V K_L^2 + 2\gamma_b (\gamma_a \gamma_b - K_V^2)) \pm \frac{1}{\gamma_a} \sqrt{D} \quad (4.21a)$$

mit

$$D = 4\gamma_b^2 (K_V^2 - \gamma_a \gamma_b)^2 + (K_V^2 - \gamma_a \gamma_b) (4\gamma_a \gamma_b (\omega_b^2 + K_L^2) - 4\gamma_b K_V K_L^2 + K_L^4) \quad (4.21b)$$

Damit ergeben sich zwei Möglichkeiten, reelle Nullstellen des Absorptionsprofils zu finden:

1.) Läßt man die Linienbreiten des nur über die Kopplung angeregten Oszillators gegen Null gehen, d.h. $\gamma_b \rightarrow 0$, ergibt sich unmittelbar aus den Gln.(2.45) und (2.56), daß auch die Geschwindigkeitskopplung K_V verschwindet. Damit erhält man aus (4.21) für die Nullstelle von $\hat{I}_{aa}(\omega)$

$$\omega_E^2 = \omega_b^2 + K_L^2$$

Durch Lagenkopplung eines gedämpften Oszillators, der durch eine periodische Kraft angeregt wird, an einen praktisch ungedämpften Oszillator läßt sich durch die Wahl der geeigneten Einstrahlungsfrequenz erreichen, daß das System dämpfungsfrei angetrieben werden kann. Bild 27 und 28 zeigen an einem Beispiel das Verhalten der Oszillatoren. Nimmt man für den Oszillator "a" die Eigenfrequenz $\omega_a = 1001 \text{ sec}^{-1}$ mit der Linienbreite $\gamma_a = 100 \text{ sec}^{-1}$ und für "b" die Eigenfrequenz $\omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}$ mit der Breite $\gamma_b = 10, 5, 1, 0 \text{ sec}^{-1}$ und den Kopplungskonstanten $K_V = 0$ und $K_L = 100 \text{ sec}^{-1}$, läßt sich schon bei $\gamma_b = 10 \text{ sec}^{-1}$ im Absorptionsprofil $\hat{I}_{aa}(\omega)$ eine Senke bei $\omega_E = \sqrt{\omega_b^2 + K_L^2} = 1004,99 \text{ sec}^{-1}$ feststellen, die mit abnehmendem γ_b immer tiefer wird. Bei $\gamma_b = 0$ die Absorption an der Stelle $\omega = \omega_E$ exakt auf Null zurück. Zerlegt man $\hat{I}_{aa}(\omega)$ nach (3.9) in die Anteile der Moden 1 und 2, erhält man mit obigen Werten:

$$\hat{I}_{aa}(\omega) \approx \frac{1}{\omega} \chi_1''(\omega) - 2,4 \cdot 10^{-8} \chi_1'(\omega) - 2,5 \cdot 10^{-3} \frac{1}{\omega} \chi_2''(\omega) + 2,4 \cdot 10^{-8} \chi_2'(\omega) \quad (4.22)$$

Wie man nachrechnen kann, ist die Frequenz ω_E etwa gleich der Eigenfrequenz der Mode 2: $\omega_2 \approx \omega_E$, so daß in diesem Punkt $\chi_2'(\omega)$ fast verschwindet. Der Anteil $\chi_1''(\omega)/\omega$ läßt sich in der Nähe von ω_E durch sein Maximum beschreiben.

Da das Verhältnis $(\omega \chi'_1(\omega)/\chi''_1(\omega))_{\omega=\omega_E} \approx 500$ ist, läßt sich $\hat{I}_{aa}(\omega)$ bei $\omega = \omega_E$ folgendermaßen schreiben:

$$\hat{I}_{aa}(\omega_E) \approx \frac{1}{\omega_E} \chi''_1(\omega_E) (1 - 2,5 \cdot 10^{-3} \cdot \chi''_2(\omega_E)/\chi'_1(\omega_E))$$

Da $\chi''_2(\omega_E)/\chi'_1(\omega_E) \approx 400$ ist, verschwindet $\hat{I}_{aa}(\omega_E)$ an dieser Stelle. Aus Gl.(3.6) folgt der allgemeine Zusammenhang zwischen absorptiver und dispersiver Response:

$$\chi'_{aa}(\omega) + \chi''_{aa}(\omega) = \frac{P_b(-i\omega) P_b(-i\omega)^*}{P_{ab}(-i\omega)^2 (P_{ab}(-i\omega)^2)^*} \cdot \frac{1}{m^2} \quad (4.23)$$

so daß mit $P_b(-i\omega) = -\omega^2 + \omega_b^2 + K_L^2$ auch $\chi'_{aa}(\omega)$ bei $\omega = \omega_E$ verschwindet. Damit bleibt der Oszillator "a" trotz Anregung in Ruhe. Der negative Beitrag von $\chi''_2(\omega)$ in (4.22) verursacht aber eine Anregung des Oszillators "b" über die Kopplung. Sein Verhalten wird überwiegend durch die Mode 2 bestimmt, und für die Intensität läßt sich mit obigen Zahlenwerten schreiben:

$$\hat{I}_{ab}(\omega) \approx 4,531 \cdot 10^{-4} \chi''_2(\omega)/\omega + 2,5 \cdot 10^{-5} \chi'_2(\omega)$$

In Bild 28 ist zu sehen, daß in $\hat{I}_{ab}(\omega)$ der Einfluß von $\chi'_2(\omega)$ überwiegt, wobei $\chi'_2(\omega)$ rasch abfällt und für $\omega > \omega_2$ negative Werte annimmt. Um ω_2 wächst der Anteil von $\chi''_2(\omega)$ merklich an, so daß insgesamt $\hat{I}_{ab}(\omega)$ bei $\omega = \omega_E$ ebenfalls verschwindet. Entsprechend zur obigen Beziehung erhält man für

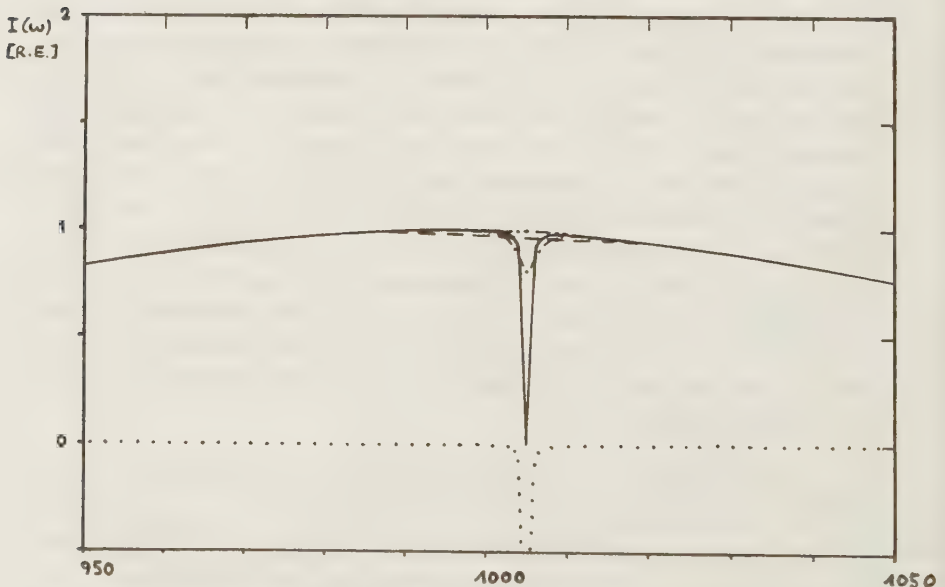


Bild 27: Absorptionsprofil $I(\omega)$ für $\gamma_b = 10$ (---), 1 (-.-.-), 0 (—) sec^{-1} $\omega [\text{sec}^{-1}]$
 Beitrag der Mode 1 für alle γ_b : (-.-.-), der Mode 2 für $\gamma_b = 0$ (....)
 $\omega_a = 1001 \text{ sec}^{-1}$, $\omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}$, $K_L = \gamma_a = 100 \text{ sec}^{-1}$

die dispersive Response mit den Gln.(3.6) und (3.1) bei $\omega = \omega_E$:

$$\chi'_{ab}(\omega) = -(m K_L^2)^{-1}$$

so daß man insgesamt die Lösungen: $\langle x_a(t) \rangle = 0$, $\langle x_b(t) \rangle = -a \cdot \cos \omega_E t / K_L^2$ erhält, wenn man das System periodisch mit der Eigenfrequenz ω_E anregt. Während Oszillator "a" wegen der starken Dämpfung in Ruhe bleibt, schwingt "b" über die Kopplung mit einer Phase von 180° und einer Amplitude, die umgekehrt proportional zum Quadrat der Kopplungsstärke ist. Dieser idealisierte Fall soll darstellen, daß mechanische Systeme trotz Dämpfung mit minimaler Verlustleistung betrieben werden können.

ii.) Eine zweite Möglichkeit zur Erzeugung von Dämpfungseinbrüchen ergibt sich aus der Betrachtung der Diskriminanten D in (4.21b). Da die Lösung von (4.21a) reell sein muß, folgt, daß $D \geq 0$ sein muß. Da nach (2.56) immer $|K_V| \leq \sqrt{\gamma_a \gamma_b}$ gilt, wird die Bedingung $D \geq 0$ nur erfüllt, wenn $K_V^2 = \gamma_a \gamma_b$ und damit die Diskriminante D verschwindet. In (4.31a) wird dann

$$\omega_E^2 = \omega_b^2 + K_L^2 (1 + \sqrt{\gamma_b / \gamma_a}) \quad (4.24)$$

Ein Beispiel für das Entstehen dieses Dämpfungseinbruches wurde schon in Kap.III.5, Bild 13 gezeigt, wo man die Wanderung von ω_E mit Zunahme der

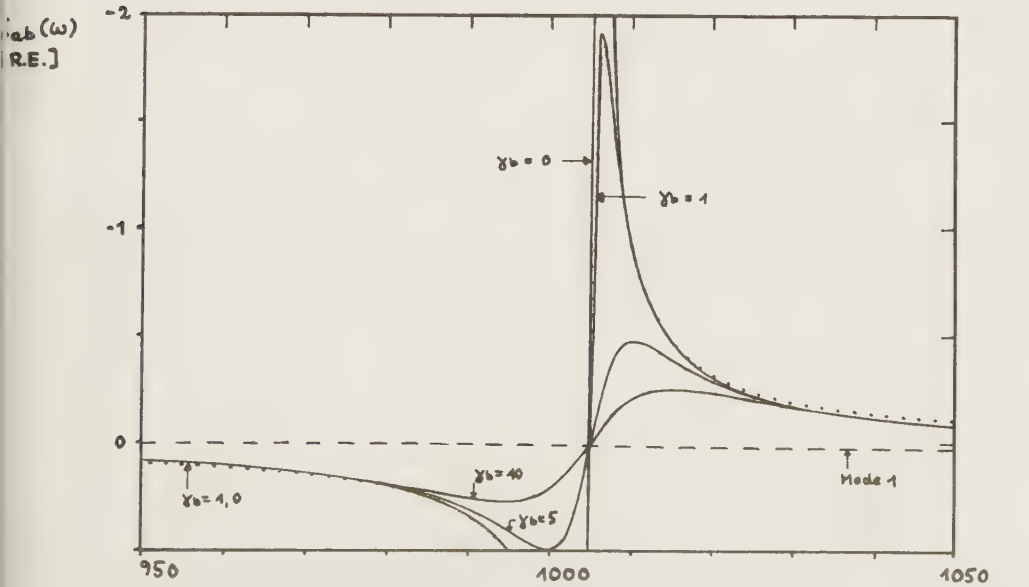


Bild 28: $I_{ab}(\omega)$ für $\gamma_b = 10, 5, 1, 0 \text{ sec}^{-1}$. Der Beitrag der Mode 1 (---) ist für alle γ_b gleich. Der Beitrag der Mode 2 (....) ist nur für $\gamma_b = 1$ gezeichnet.

Lagenkopplung beobachten kann. Die Existenz einer Lagenkopplung ist für diesen Effekt nicht wesentlich, so daß im zweiten Beispiel in Abschnitt IV.2 (Bilder 22-24) K_L gleich Null gesetzt wurde. Dort wurde schon erklärt, wie in der Mode 2 der Anteil von $\chi'_2(\omega)$ dafür sorgt, daß ein Energietransfer von "a" nach "b" über das Bad stattfindet, und damit keine Dissipation eintritt. Gleichzeitig verschwindet (auch bei Vorhandensein von Lagenkopplung) die absorptive Response $\chi''_{ab}(\omega)$ bei $\omega = \omega_E$. Die dispersiven Responses $\chi'_{aa}(\omega)$ und $\chi'_{ab}(\omega)$ verschwinden beide nicht, $\chi'_{ab}(\omega)$ hat aber ein negatives Vorzeichen, so daß die Oszillatoren "b" die entgegengesetzte Phase zu den Oszillatoren "a" haben, die in Phase mit der eingestrahlten Welle schwingen. Aus (4.16) lassen sich die Lösungen für die leicht verstimmten Oszillatoren berechnen:

$$\langle x_a(t) \rangle = \frac{a}{4\delta\Omega_S} \cos \omega_b t, \quad \langle x_b(t) \rangle = \frac{-a}{4\delta\Omega_S} \cos \omega_b t \quad (4.25)$$

Die Energie des Systems läßt sich durch die Integration der Bewegungsgleichungen (siehe Anhang A5) berechnen. Dabei erhält man für die während einer Periode aufgenommene Energie:

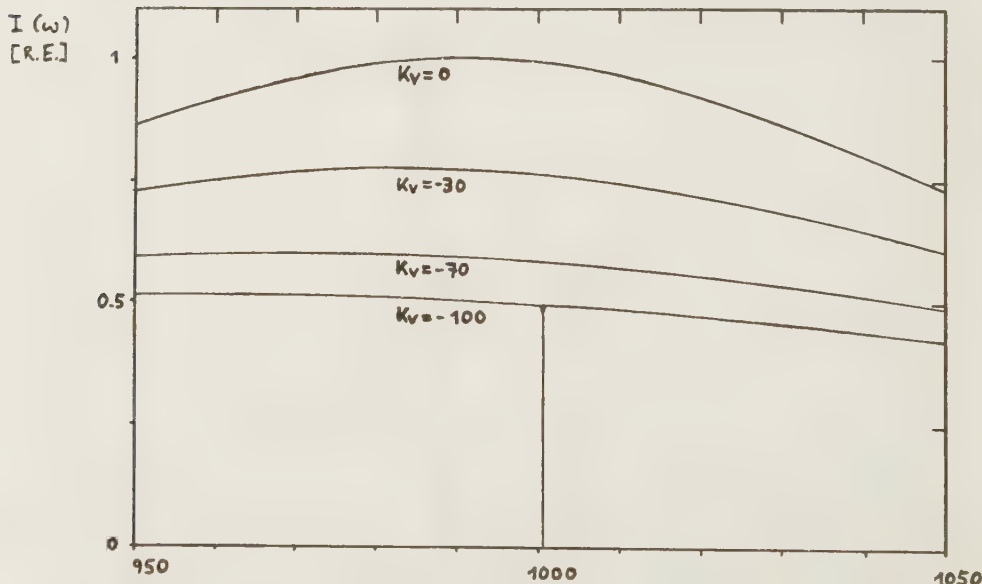


Bild 29a): Gesamtabsorption $I(\omega)$ für zwei angeregte Moden für

$$K_V = 0, -30, -70, -100 \text{ sec}^{-1}, \quad \xi = 1.$$

$$\omega_a = 1001 \text{ sec}^{-1}, \quad \omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}, \quad \gamma_a = \gamma_b = 100 \text{ sec}^{-1}$$

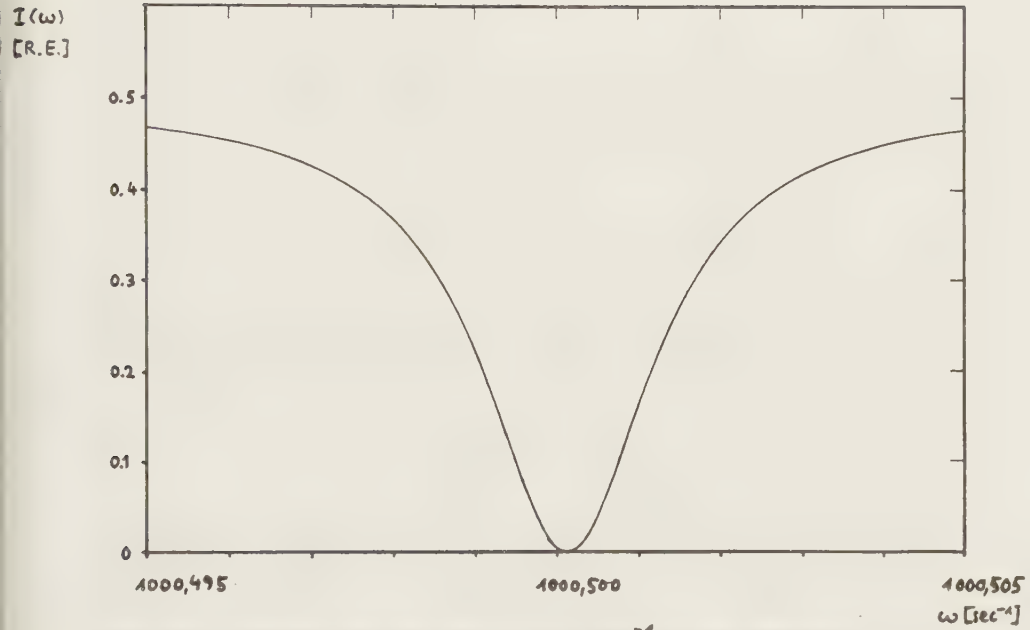


Bild 29b): Spreizung von $I(\omega)$ für $K_V = -100 \text{ sec}^{-1}$ in der Nähe des Dämpfungseinbruchs bei $\omega_E = \sqrt{(\omega_c^2 + \omega_0^2)}/2$

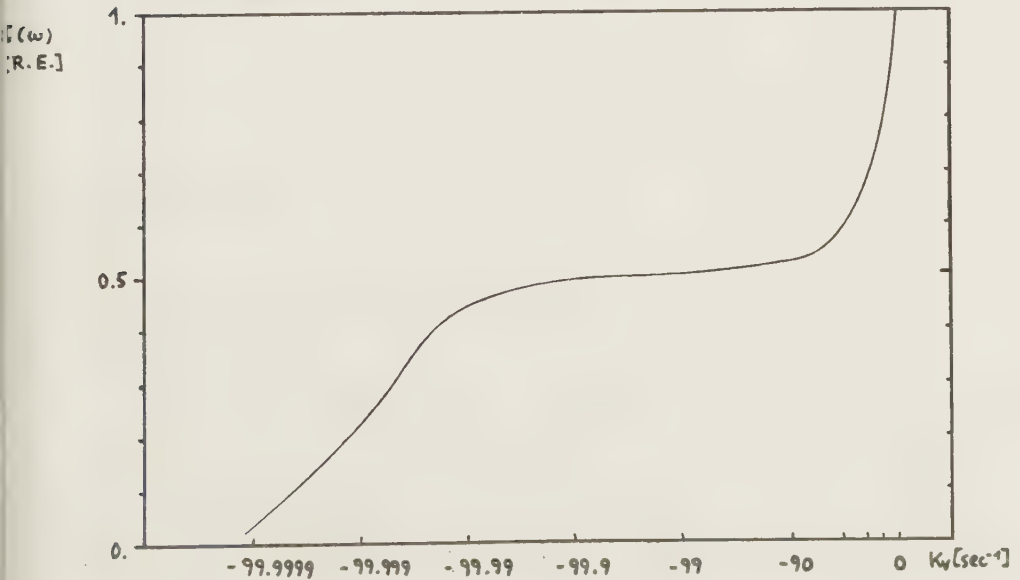


Bild 29c): Verhalten von $I(\omega)$ bei $\omega = \omega_E$ in Abhängigkeit von K_V .

$$\begin{aligned} \Delta E = & -2\gamma_a m \int_t^{t+2\pi/\omega} dt' \langle \dot{x}_a(t') \rangle^2 - 2\gamma_b m \int_t^{t+2\pi/\omega} dt' \langle \dot{x}_b(t') \rangle^2 \\ & + 4K_V m \int_t^{t+2\pi/\omega} dt' \langle \dot{x}_a(t') \rangle \langle \dot{x}_b(t') \rangle \\ & + \int_t^{t+2\pi/\omega} dt' F(t') (\langle \dot{x}_a(t') \rangle + S \langle \dot{x}_b(t') \rangle) \end{aligned} \quad (4.26)$$

Für den besprochenen Fall haben die Oszillatoren die gleichen Linienbreiten $\gamma_a = \gamma_b = \gamma_s$ und die maximale Geschwindigkeitskopplung $K_V = -\gamma_s$. Da nur der Oszillator "a" angetrieben wird, ist $s=0$. Mit den Lösungen (4.25) läßt sich (4.26) unmittelbar integrieren, und man erhält:

$$\Delta E = -m a^2 \frac{\pi \omega_b}{4 \gamma_s \Omega_s} + m a^2 \frac{\pi \omega_b}{4 \gamma_s \Omega_s} = 0 \quad (4.27)$$

Die beiden ersten Terme in (4.26), die die Dissipation der Energie beschreiben, werden also im Dämpfungseinbruch bei ω_E und bei maximaler Kopplung kompensiert durch den dritten Term, der die Rate der vom Bad ins Oszillatorsystem transportierten Energie beschreibt. Der vierte Term, der die von außen zugeführte Energie darstellt, ist Null während einer Periode.

Man muß also in dissipativen Systemen, bei denen nur eine Mode angeregt wird, stets mit Dämpfungseinbrüchen rechnen, die in der Nähe der Frequenzen von außen nicht angeregter Moden auftreten.

Eine interessante Möglichkeit zur Erzeugung von Dämpfungseinbrüchen ist die Anregung des Oszillatorsystems im Gleichtakt, d.h., daß beide Moden gleichphasig angetrieben werden ($s=+1$). In Bild 29a) ist der Verlauf eines Absorptionsprofiles für verschiedene K_V aufgezeichnet. Das Beispiel hat die Zahlenwerte von Bild 18, stellt also das Absorptionsverhalten von zwei leicht verstimmten Oszillatoren mit gleicher Linienbreite und verschwindender Lagenkopplung dar. Man bemerkt bei Zunahme der Geschwindigkeitskopplung ein allmähliches Abflachen der Absorptionsstärke, deren Maximum gegen $1/2$ geht, wenn das Profil auf das Maximum der ungekoppelten Zustände normiert ist. Bei $K_V = -\gamma_s$ entsteht bei $\omega_E^2 = \Omega_s = (\omega_a^2 + \omega_b^2)/2$ ein sehr schmaler Einbruch, der in Bild 29a) die Breite der senkrechten Linie hat. Die Spreizung in Bild 29b) läßt erkennen, daß dies ein echter Dämpfungseinbruch mit einer Halbwertsbreite von $2\gamma_a = \delta^2 \Omega_s / \gamma_s$ (siehe Gl.(3.35)) ist. Bild 29c) zeigt das Verhalten des Maximums der Gesamtaborption bei $\omega = \omega_E$ in Abhängigkeit von der Kopplung. Man sieht, daß der Wert von 1 ($K_V = 0$) bis 0,5 ($K_V = -90 \text{ sec}^{-1}$) absinkt, bis

$K_V = -99,99 \text{ sec}^{-1}$ etwa konstant bleibt und dann sehr rasch gegen Null abfällt, was ein typischer Effekt der Geschwindigkeitskopplung ist. Das Absorptionsprofil ist nämlich gegeben durch die Gl.(4.15) mit $s=1$:

$$\hat{I}(\omega) = (\chi''_{aa}(\omega) + 2\chi''_{ab}(\omega) + \chi''_{bb}(\omega)) / \omega$$

was sich mit Gl.(4.16) schreiben läßt:

$$\hat{I}(\omega) = \frac{1}{\omega} \left\{ \left(2 + \frac{\epsilon^2}{2}\right) \chi''_1(\omega) - \frac{\epsilon^2}{2} \chi''_2(\omega) \right\} + \frac{\epsilon^2}{2\sqrt{\Omega_S}} \left\{ \chi'_1(\omega) - \chi'_2(\omega) \right\} \quad (4.28)$$

Daraus und aus den Bildern 22 - 26 läßt sich das Verhalten der Absorption ersehen: Die Mode 1 bestimmt das Verhalten von $\hat{I}(\omega)$, solange ω sich nicht nahe bei $\omega_E = \sqrt{\Omega_S}$ befindet. In der Nähe von $\omega = \omega_E$ bestimmt die Mode 2 das Verhalten, wobei gilt:

$$\chi''_{aa}(\omega) \approx \chi''_{bb}(\omega) \approx -\chi'_{ab}(\omega) \quad \omega \approx \sqrt{\Omega_S}$$

so daß sich insgesamt die Beiträge der verschiedenen Responsefunktionen aufheben. Die Beiträge von $\chi''_1(\omega)$, $\chi'_1(\omega)$ und $\chi'_2(\omega)$ in (4.28) sorgen noch dafür, daß die Absorption nicht bei $\omega_2 = \sqrt{\Omega_S(1+2\delta\epsilon)}$ verschwindet, sondern exakt bei ω_E :

$$\hat{I}(\sqrt{\Omega_S}) = 0$$

was zu dem Dämpfungseinbruch in Bild 29a),b) führt. Berechnet man die Responsefunktion für $\omega = \sqrt{\Omega_S}$, $K_V = -\gamma_S$, $K_L = 0$ und $\delta_a = \delta_b = \gamma_S$, erhält man (siehe auch Anhang A6):

$$\chi''_{aa}(\sqrt{\Omega_S}) = \chi''_{bb}(\sqrt{\Omega_S}) = -\chi'_{ab}(\sqrt{\Omega_S}) = \frac{2\gamma_S\sqrt{\Omega_S}}{m\Omega_S^2} = \frac{\gamma_S}{2m\delta^2\Omega_S^{3/2}} \quad (4.29a)$$

$$\chi'_{aa}(\sqrt{\Omega_S}) = -\chi'_{bb}(\sqrt{\Omega_S}) = \frac{1}{m\Omega_S} = \frac{1}{2m\delta\Omega_S}, \quad \chi'_{ab}(\sqrt{\Omega_S}) = 0 \quad (4.29b)$$

Damit erhält man die Lösungen nach Gl.(4.14):

$$\langle x_a(t) \rangle = \frac{a}{2\delta\Omega_S} \cos \omega_E t, \quad \langle x_b(t) \rangle = \frac{-a}{2\delta\Omega_S} \cos \omega_E t \quad (4.30)$$

Vergleicht man dies mit den Lösungen der entkoppelten Oszillatoren ($K_V=0$)

$$\langle x_a^0(t) \rangle_{K_V=0} \approx \frac{a\delta}{2\gamma_S^2} \cos \omega_E t + \frac{a}{2\gamma_S\sqrt{\Omega_S}} \sin \omega_E t \quad (4.31a)$$

$$\langle x_b^0(t) \rangle_{K_V=0} \approx \frac{-a\delta}{2\gamma_S^2} \cos \omega_E t + \frac{a}{2\gamma_S\sqrt{\Omega_S}} \sin \omega_E t \quad (4.31b)$$

bei derselben Eigenfrequenz, sieht man, daß die Amplitude der gekoppelten Oszillatoren um den Faktor 200 größer ist als die der ungekoppelten. Im

Im Vergleich zu dem in diesem Abschnitt unter ii) besprochenen System, bei dem nur eine Mode angeregt wird, haben die Lösungen die doppelte Amplitude, verhalten sich ansonst aber wie in ii) beschrieben, d.h. $\langle x_a(t) \rangle$ ist in Phase mit der eingestrahlten Welle, $\langle x_b(t) \rangle$ ist um 180° dazu phasenverschoben. Beide Oszillatoren bewegen sich im Gegentakt und die vom System während einer Periode aufgenommene oder abgegebene Energie bei $\omega = \omega_E$ ist wiederum gleich Null (Gl.(4.26)):

$$\Delta E(\sqrt{\Omega_S}) = 0$$

Sind χ_a und χ_b verschieden, oder hat die Lagenkopplung einen nichtverschwindenden Anteil, verschiebt sich die Einbruchsfrequenz ω_E , die Existenz eines Dämpfungseinbruchs ist aber nach wie vor abhängig von der Geschwindigkeitskopplung, so daß es nicht notwendig ist, weiter darauf einzugehen. Ebenso erhält man für $K_V=0$ und für verschwindende Dämpfung, etwa $\chi_b=0$, einen Dämpfungseinbruch an der Stelle

$$\omega_E^2 = \omega_b^2 + 2K_L^2$$

wobei sich die Oszillatoren wie im Fall i) verhalten.

Insgesamt erhält man also zwei Möglichkeiten zur verlustfreien Anregung von Oszillatorsystemen. Die erste beruht auf dem Vorhandensein einer Lagenkopplung zwischen einem stark gedämpften angeregten Oszillator und einem von außen nicht angeregten Oszillator mit annähernd verschwindender Dämpfung. Dabei kommt der angeregte Oszillator zur Ruhe und überträgt über die Kopplung die eingestrahlte Energie auf den nicht angeregten Oszillator, der mit der Phase 180° schwingt und eine Amplitude hat, die umgekehrt proportional zum Quadrat der Kopplungsstärke ist.

Die zweite Möglichkeit nutzt den Effekt der Geschwindigkeitskopplung über das Bad aus. Obwohl beide Oszillatoren, wenn sie voneinander isoliert sind, große Dämpfungskonstanten haben können, gelingt es doch bei der Frequenz ω_E , sie ohne Verlustleistung zu betreiben, wenn sie einen Abstand in der Größenordnung der freien Weglänge eines Badmoleküls haben, die Geschwindigkeitskopplung also ihren Maximalwert erreicht (siehe Kap.II). In diesem Fall schwingen beide Oszillatoren, der mit der größeren Frequenz in Phase mit der eingestrahlten Welle, der mit der kleineren in Gegenphase mit gleicher Amplitude, die nun umgekehrt proportional zu $(\omega_a^2 - \omega_b^2)^2$ ist. Dabei sind die Amplituden des zweifach angeregten Systems doppelt so groß wie die des einfach angeregten Systems. Wesentlich für die Existenz eines Dämpfungseinbruchs ist der Aufbau einer Gegentaktschwingung im Oszillatorsystem, wobei eine Mode in Phase mit der eingestrahlten Welle ist.

Eine Möglichkeit zur Anwendung dieses Modells besteht in der Betrachtung von Schwingungsmoden in Molekülspektren. Evans [28] hatte als erster darauf hingewiesen, daß Transmissionsfenster ("Evans-Holes") durch Fermiresonanz zweier nahe beieinanderliegender Energieniveaus entstehen können, von denen das eine eine breite Bande, das andere eine relativ schmale Bande verursacht. In einem Modell von Weidemann und Hayd [27] wurde die Resonanzkopplung über Wasserstoffbrücken zwischen einem IR-aktiven und einem IR-inaktiven Übergang behandelt, wobei ein Teilergebnis die Entstehung dieser Evans-Holes war. In einem weiteren Modell, basierend auf Diestler [31], berechneten Fujita und Kimura [35] Profile von Fermi-Resonanz-Spektren, die Evans-Holes beinhalten. In ihrem Modell ist allerdings der Einfluß der direkten Kopplung der beiden Moden dominant, die der Lagenkopplung entspricht, während die Kopplung über das Bad, also die Geschwindigkeitskopplung, vernachlässigt wird. Bei intermolekularen Wechselwirkungen von langkettigen organischen Molekülen in Flüssigkeiten können ebenfalls Dämpfungseinbrüche (Evans-Holes) beobachtet werden können (vgl. [40], p273). Da diese Moleküle von ihrer Größe her eher einer klassischen Betrachtung zugänglich sind, kann man dieses Modell darauf anwenden. So läßt es sich insgesamt vermuten, daß bei diesen Prozessen überwiegend die Geschwindigkeitskopplung verantwortlich ist. Genauere Untersuchungen, vor allem im Hinblick auf quantenmechanische Effekte, sind allerdings notwendig.

Das hier vorliegende klassische Modell ist allerdings nicht ohne weiteres auf Spektren anwendbar, solange quantenmechanische Effekte eine Rolle spielen. Betrachtet man nun Systeme, die über Induktionswechselwirkung mit rasch fluktuierenden inneren Feldern koppeln, z.B. Molekülschwingungen in polaren Flüssigkeiten, so läßt sich diese Wechselwirkung als Geschwindigkeitskopplung interpretieren. Die α_3 und α_4 in (2.7) werden proportional zu den Übergangsdipolmomenten und damit komplexe Zahlen. Die Kopplungsstärke K_V kann dann einen von Null verschiedenen Phasenfaktor bekommen, der diese Größe komplex macht. Damit gelangt man zu Formeln für das Absorptionsprofil, die in Übereinstimmung sind mit den Ergebnissen der Arbeit von Weidemann und Hayd [27]. Prinzipiell dürfte die quantenmechanische Formulierung dieses Modells mit dem Hamiltonoperator (2.85) keine Schwierigkeiten bereiten. Die Durchführung der Rechnung, die allerdings mit einigem Aufwand verbunden ist, könnte zu einer besseren Interpretation von "Evans-Holes" in Molekülspektren führen.

IV.4 Langlebige Zustände, Laser-Effekt und Schawlow-Townes-Bedingung

Im letzten Abschnitt wurde gezeigt, wie bei Einstrahlung einer monochromatischen Welle und optimaler Geschwindigkeitskopplung $K_V = -\sqrt{\gamma_a \gamma_b}$ Dämpfungseinbrüche im Absorptionsprofil entstehen. Mit dieser Kopplung erhält man gleichzeitig ein scharfes Absorptionsmaximum (Bilder 13, 22-24), dessen Höhe und Halbwertsbreite von der Differenz der ungestörten Eigenfrequenzen und der Dämpfungskonstanten abhängt. Nach Abschnitt IV.2 liegt das Maximum von $\hat{I}_{aa}(\omega)$ und $\hat{I}_{bb}(\omega)$ bzw. das Minimum von $\hat{I}_{ab}(\omega)$ für leicht verstimmte Oszillatoren mit gleicher Linienbreite an der Stelle

$$\omega^2 = \omega_2^2 = \Omega_s^2 (1 + \delta \epsilon) \quad (4.32)$$

wobei in diesem Bereich die Mode 2 überwiegend das Verhalten sowohl der dispersiven als auch der absorptiven Responsefunktionen bestimmt (Bilder 17-26). Dieses Verhalten läßt sich zur Erzeugung von langlebigen Zuständen nutzen, wie sie in Abschnitt IV.1 für ein δ -funktionsartiges Wellenpaket schon gerechnet wurden. Um zu einer physikalisch realistischeren Betrachtung zu gelangen, sollen nun Wellenpakete mit endlicher Kohärenzlänge in das System eingestrahlt werden. Betrachtet man eine Anordnung, bei der etwa der Oszillator "a" eine Ladung trägt, und der Antrieb des Systems durch ein elektrisches Feld erfolgt ($s=0$), erhält man als Lösungen für schwach verstimmte Oszillatoren mit gleicher Linienbreite nach Abschnitt III.5.iii) (Seite 60) und Gl.(4.1), wenn man nur Beiträge in niederster Ordnung von δ bzw. ϵ berücksichtigt ($T=t-t'$):

für verschwindende Kopplung ($w_1^2 = \omega_a^2 - \gamma_s^2$):

$$\langle x_a(t) \rangle = \int dt' F(t') \frac{\Theta(T)}{m} e^{-\gamma_s T} \frac{\sin w_1 T}{w_1}, \quad \langle x_b(t) \rangle = 0 \quad (4.33a)$$

und für optimale Kopplung $K_V = -\gamma_s$ die Gleichtaktschwingung

$$\begin{aligned} \langle x_a(t) \rangle + \langle x_b(t) \rangle = \int dt' F(t') \frac{\Theta(T)}{m} & \left[\frac{1-\delta}{w_1} e^{-\gamma_1 T} \sin(w_1 T - \frac{\epsilon}{2}) \right. \\ & \left. + e^{-\frac{\gamma_s T}{2}} \frac{\delta(1+\epsilon)}{2\gamma_s} \cos(w_2 T + \frac{\epsilon}{2}) \right] \end{aligned} \quad (4.33b)$$

und die Gegentaktschwingung

$$\begin{aligned} \langle x_a(t) \rangle - \langle x_b(t) \rangle = \int dt' F(t') \frac{\Theta(T)}{m} & \left[\frac{\delta}{2\gamma_s} e^{-\gamma_1 T} \cos(w_1 T - \frac{2\gamma_s}{w_1}) \right. \\ & \left. + \frac{1}{w_2} e^{-\gamma_2 T} \sin(w_2 T + \frac{\epsilon}{2}) \right] \end{aligned} \quad (4.33c)$$

mit $w_1^2 = \omega_1^2 - \gamma_s^2$, $w_2^2 = \omega_2^2 - \gamma_2^2$ (siehe (3.29)). Das äußere Feld soll durch

Wellenpakete der Form

$$F(t) = \frac{a_m}{2\Delta t} \sum_{m=0}^M \cos w_2(t-t_m) [\Theta(t-t_m+\Delta t) - \Theta(t-t_m-\Delta t)] \quad (4.34)$$

mit einer Kohärenzzeit $2\Delta t$ beschrieben werden [47], die in der Zeit von $t=-\tau-\Delta t$ bis $t=\tau+\Delta t$ ($-\tau \leq t_m \leq \tau$) eingestrahlt werden (siehe Bild 30). Betrachtet man nur ein Wellenpaket zur Zeit $t_0=0$ ($M=0$), erhält man als Lösung von (4.33b,c), wenn man wieder Beiträge der Ordnung δ^2 , ε^2 und γ_s^2/Ω_s vernachlässigt und als Kohärenzzeit $2\Delta t=1/\gamma_s$ annimmt ($t \pm \Delta t$):

für die Gleichtaktschwingung:

$$\langle x_a(t) \rangle + \langle x_b(t) \rangle = (X_1^+ + X_2^+ + X_3^+) \Theta(t+\Delta t) \quad (4.35a)$$

mit

$$X_1^+(t) = \frac{a}{4} \left[\frac{\sin w_1 t}{w_1} + \frac{\delta}{\gamma_2} \cos w_2 t \right] (1 - \Theta(t - \Delta t)) \quad (4.35b)$$

$$X_2^+(t) = \frac{a}{4} \left[\frac{\sin w_1 t}{w_1} e^{-\gamma_1(t-\Delta t)} + \frac{\delta}{\gamma_2} \cos w_2 t e^{-\gamma_2(t-\Delta t)} \right] \Theta(t - \Delta t) \quad (4.35c)$$

$$X_3^+(t) = -\frac{a}{4} \left[\frac{\sin w_1 t}{w_1} e^{-\gamma_1(t+\Delta t)} + \frac{\delta}{\gamma_2} \cos w_2 t e^{-\gamma_2(t+\Delta t)} \right] \quad (4.35d)$$

und für die Gegentaktschwingung:

$$\langle x_a(t) \rangle - \langle x_b(t) \rangle = (X_1^- + X_2^- + X_3^-) \Theta(t+\Delta t) \quad (4.36a)$$

mit

$$X_1^-(t) \approx \frac{a}{4} \frac{\gamma_s}{\gamma_2 w_2} \sin w_2 t (1 - \Theta(t - \Delta t)) \quad (4.36b)$$

$$X_2^-(t) \approx \frac{a}{4} \frac{\gamma_s}{\gamma_2 w_2} \sin w_2 t e^{-\gamma_2(t-\Delta t)} \Theta(t - \Delta t) \quad (4.36c)$$

$$X_3^-(t) \approx -\frac{a}{4} \frac{\gamma_s}{\gamma_2 w_2} \sin w_2 t e^{-\gamma_2(t+\Delta t)} \quad (4.36d)$$

Man sieht, daß die Beiträge $X_1^+ + X_3^+$ für $-\Delta t \leq t \leq \Delta t$ das Verhalten der Oszillatoren während der Einstrahlungszeit des Wellenpakets darstellen. Die Amplitude der Gleichtaktschwingung $A_{GL}(t)$ wird für diesen Zeitraum im wesentlichen vom Beitrag der Mode 1 bestimmt

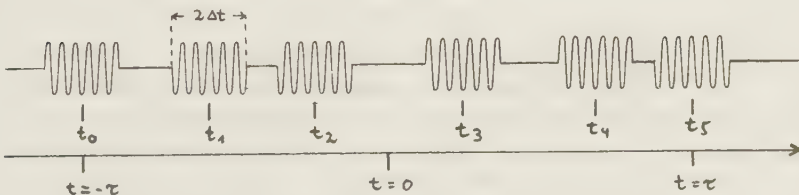


Bild 30: Skizze zu den Wellenpaketen (4.34) für $M=5$

$$A_{GL}(t) \approx \frac{a \gamma_3}{4 w_1} (1 - e^{-\gamma_1(t+\Delta t)}) \quad (4.37a)$$

während die Amplitude der Gegentaktschwingung $A_{GG}(t)$ von der Mode 2 dominiert wird:

$$A_{GG}(t) \approx \frac{a \gamma_3}{4 w_2 \gamma_2} (1 - e^{-\gamma_2(t+\Delta t)}) \approx \frac{a \gamma_3}{4 w_2} (t + \Delta t) \quad (4.37b)$$

Das Anwachsen der Amplituden wird von $X_3^+(t)$ bzw. $X_3^-(t)$ bestimmt. Die Anwachsrate der Amplituden $(d(A(t)-A_\infty)/dt)/(A(t)-A_\infty)$ mit $A_\infty = A(t \rightarrow \infty)$ verhalten sich also wie

$$\left(\frac{1}{X_3} \frac{dX_3^-}{dt} \right) / \left(\frac{1}{X_3^+} \frac{dX_3^+}{dt} \right) \approx \gamma_2 / \gamma_1 \quad (4.37c)$$

was bedeutet, daß das Oszillatorsystem über die Mode 1, die im wesentlichen die Gleichtaktmode ist, die eingestrahlte Energie absorbiert und über die interne Modenkopplung die Gegentaktmode 2 anregt. Am Ende der Einstrahlung bei $t = \Delta t = 1/2\gamma_3$ verhalten sich die Amplituden wie

$$A_{GL} / A_{GG} \approx w_2 / w_1 \approx 1 \quad (4.38)$$

beide Moden enthalten also etwa die gleiche Energie.

Für $t > \Delta t$ schwingt das System frei, die Lösungen werden durch die Beiträge $X_2^+ X_3^+$ in (4.35) bzw. (4.36) bestimmt. Für die Amplituden erhält man nun:

$$A_{GL}(t) \approx \frac{a}{4 w_1} e^{-\gamma_1(t-\Delta t)} (1 - e^{-2}) \approx \frac{a}{4 w_1} e^{-\gamma_1(t-\Delta t)} \quad (4.39a)$$

$$A_{GG}(t) \approx \frac{a}{4 w_2} \frac{\gamma_3}{\gamma_2} e^{-\gamma_2(t-\Delta t)} \cdot 2\gamma_2 \Delta t \approx \frac{a}{4 w_2} e^{-\gamma_2(t-\Delta t)} \quad (4.39b)$$

Man sieht, daß wie bei der Stoßanregung (siehe IV.1) die Gleichtaktmode stark gedämpft wird ($\gamma_1 \approx 2\gamma_3$), so daß ihre Amplitude für Zeiten $t \geq 1/\gamma_3$ keinen Beitrag mehr ergibt, während die Gegentaktmode, in der die Hälfte der absorbierten Energie enthalten ist, nur mit einer Dämpfungskonstanten γ_2 ($\approx 10^{-5}\gamma_3$ im Standardbeispiel) abfällt, so daß ihre Amplitude während einer langen Zeitdauer ($t \lesssim 10^4/\gamma_3$) praktisch konstant bleibt.

Es ist also möglich, im Oszillatorsystem in der Gegentaktmode Energie über einen langen Zeitraum zu speichern. In diesem Beispiel wird die absorbierte Leistung nur zur Hälfte über die Mode 1, die Gleichtaktmode, dissipiert, während die andere Hälfte in der Gegentaktmode 2 gespeichert wird. Die Absorption vieler Wellenpakete läßt sich mit Gl.(3.26) beschreiben. Für das Betragsquadrat der Fouriertransformierten von $F(t)$ erhält man

$$F(\omega)F(\omega)^* = \frac{m^2 a^2}{4 \Delta t^2} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^M \int_{t_n-\Delta t}^{t_n+\Delta t} dt \int_{t_n-\Delta t}^{t_n+\Delta t} dt' \cos w_2(t-t_m) \cos w_2(t'-t_n) * e^{i\omega(t-t')} \quad (4.40a)$$

was durch Umformung

$$F(\omega) F(\omega)^* = \frac{m^2 a^2}{4 \delta t^2} \sum_{m,n} e^{i\omega(t_n - t_m)} \left[\int_{-\delta t}^{\delta t} dt \cos \omega_2 t e^{i\omega t} \right]^2 \quad (4.40b)$$

ergibt. Nach Berechnung des Integrals erhält man:

$$F(\omega) F(\omega)^* = \frac{m^2 a^2}{4} G(\omega)^2 \cdot \phi(\omega) \quad (4.40c)$$

$$G(\omega) = \frac{\sin(\omega + \omega_2) \delta t}{(\omega + \omega_2) \delta t} + \frac{\sin(\omega - \omega_2) \delta t}{(\omega - \omega_2) \delta t} \quad \phi(\omega) = \sum_{m,n} e^{i\omega(t_n - t_m)}$$

Mit Gl.(3.26) und den Responsefunktionen (4.16) erhält man so für die absorbierte Energie bei einfacher Anregung des Systems ($s=0$):

$$\Delta E = \frac{m^2 a^2}{8} \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega \phi(\omega) G(\omega)^2 \left[(1-4\delta) \chi_1''(\omega) + \chi_2''(\omega) + \frac{\delta \omega}{\delta_2} (\chi_2'(\omega) - \chi_1'(\omega)) \right] \quad (4.41)$$

Mit dem Phasenfaktor $\phi(\omega)$ von (4.40c) läßt sich neben dem Asorptionsverhalten des Systems auch sein Emissionsverhalten beschreiben. Nimmt man z.B. zwei Wellenpakete gemäß Gl.(4.34) mit $t_0=0$ und $t_1=(2\pi N + \varphi)/\omega_2$, wobei $0 \leq \varphi \leq 2$ und N so groß gewählt werden soll, daß $t_1 - t_0 > 2\delta t$ gilt, erhält man $\phi(\omega_2) = 2(1 + \cos \varphi)$ für $t > t_1 + \delta t$. Für diese Zeiten wird die Gleichtaktmode

$$\langle x_a(t) \rangle + \langle x_b(t) \rangle \approx \frac{a}{4\omega_1} e^{-\gamma_1(t - \delta t - t_1)} \sin \omega_1(t - t_1) \quad (4.42a)$$

da die Anregung durch das erste Wellenpaket schon abgeklungen ist. Für die Gegentaktmode erhält man mit $t_1 + \delta t < t < 1/\gamma_2$:

$$\langle x_a(t) \rangle - \langle x_b(t) \rangle \approx \frac{a}{4\omega_2} \left[\sin \omega_2 t (1 + \cos \varphi) - \cos \omega_2 t \cdot \sin \varphi \right] \quad (4.42b)$$

Man sieht, daß für $\cos \varphi > 0$ der Sinusanteil von (4.42b) anwächst, die Amplitude also verstärkt wird. Für $\cos \varphi < 0$ schwächt sich die Amplitude ab, wobei sie speziell für $\varphi = \pi$ verschwindet. Die Einstrahlung eines zweiten, um 180° verschobenen Wellenpaketes bewirkt also eine Emission. Viele Wellenpakete mit stochastischer Phase ergeben ein $\phi(\omega_2)$, das für die Absorption sorgt, wenn die Phasen der Wellenpakete sich addieren, und das eine Emission induziert, wenn die Phasen negativ sind. Im Mittel erhält man so eine Absorption, die mit einer ebensogroßen Emission verbunden ist. Mit der Gl.(4.41) sieht man, daß das Emissionsprofil gleich dem Absorptionsprofil ist, der Anteil der Mode 2 also in einem schmalen Frequenzband abgestrahlt wird.

Bezeichnet man mit $\phi^*(\omega_2)$ den absorbierenden Anteil des Phasenfaktors,

läßt sich Gl.(4.41) weiter berechnen. Man sieht, daß die Pole von $\chi'_{12}(\omega)$ bzw. $\chi''_{12}(\omega)$, die bei $\omega = \pm \omega_1 - i\gamma_1$ bzw. bei $\omega = \pm \omega_2 - i\gamma_2$ liegen, den Wert des Integrals bestimmen, da $G(\omega)$ in der Umgebung dieser Pole immer Eins ist. Mit Hilfe des Residuensatzes (3.30) erhält man:

$$\Delta E = \Delta E_1 + \Delta E_2 \quad (4.43a)$$

mit der Energieabsorption der Mode 1:

$$\Delta E_1 = \left[\frac{1}{2} (1 - 4\delta) + 2\delta \right] \frac{m a^2}{8} \phi^+(\omega_1) = \frac{m a^2}{16} \phi^+(\omega_1) \quad (4.43b)$$

und der Mode 2:

$$\Delta E_2 = \left[\frac{1}{2} - \delta \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \right] \frac{m a^2}{8} \phi^+(\omega_2) \approx \frac{m a^2}{16} \phi^+(\omega_2) \quad (4.43c)$$

Vergleicht man dies mit der Energieabsorption des ungekoppelten Oszillatorsystems

$$\Delta E_0 = \frac{m a^2}{8} \phi^+(\omega_2) \quad (4.43d)$$

erhält man als Verhältnis der Energien:

$$\Delta E_1 / \Delta E_0 = \Delta E_2 / \Delta E_0 = \frac{1}{2} \quad (4.43e)$$

Durch Division der ΔE ; durch die Einstrahldauer 2τ erhält man die jeweiligen Leistungen, deren spektrale Verteilung in den Bildern 22 und 25 dargestellt ist. Die scharfen Maxima der Mode 2 repräsentieren langlebige Zustände, die etwa über Dipolstrahlung mit einer Kohärenzzeit [47] $t_c = 1/2\gamma_2$ entsprechend der Halbwertsbreite des Maximums abstrahlen, wobei die Hälfte der absorbierten Energie in diesem schmalen Band verfügbar ist, wie aus Gl.(4.43) zu sehen ist.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß Einstrahlung von Wellenpaketen bei optimaler Kopplung bewirkt, daß ein langlebiger Zustand entsteht, der kohärent mit hoher Intensität abstrahlen kann, so daß das System als Verstärker wirkt. Störend ist allerdings noch die relativ hohe Dissipation des Systems durch die Mode 1, wobei außerdem eine Realisierung dieser Anordnung schwer vorstellbar ist.

Eine effektivere und physikalisch sinnvollere Möglichkeit zur Erzeugung langlebiger Zustände ist die Anregung der Oszillatoren im Gegentakt, wenn z.B. die gekoppelten Paare entgegengesetzte Ladungen tragen ($s=-1$). Entsprechend zu Gl.(4.33) erhält man wieder für schwach verstimmt Oszillatoren ($T=t-t'$):

für verschwindende Kopplung ($\omega_{1/2}^2 = \omega_{1b}^2 - \gamma_s^2$):

$$\langle x_{a/b}(t) \rangle = \int dt' F(t') \frac{\Theta(T)}{m} e^{-\gamma_s T} \frac{\sin \omega_{1/2} T}{\omega_{1/2}} \quad (4.44a)$$

und für optimale Kopplung $K_V = -\gamma_s$ die Gleichtaktschwingung:

$$\begin{aligned} \langle x_a(t) \rangle + \langle x_b(t) \rangle &= \int dt' F(t') \frac{\Theta(T)}{m} * \\ &* \frac{\delta}{\gamma_s} \left[-e^{-\gamma_1 T} (\cos \omega_1 T + \frac{2\gamma_s}{\omega_1} \sin \omega_1 T) + e^{-\gamma_2 T} \cos \omega_2 T \right] \end{aligned} \quad (4.44b)$$

und die Gegentaktschwingung:

$$\begin{aligned} \langle x_a(t) \rangle - \langle x_b(t) \rangle &= \int dt' F(t') \frac{\Theta(T)}{m} \left[e^{-\gamma_1 T} \left(\frac{\delta \epsilon}{\gamma_s} \cos \omega_1 T - \frac{\epsilon^2}{2\omega_1} \sin \omega_1 T \right) \right. \\ &\quad \left. + e^{-\gamma_2 T} \left(\frac{2 + \epsilon^2/2}{\omega_2} \sin \omega_2 T - \frac{\delta \epsilon}{\gamma_s} \cos \omega_2 T \right) \right] \end{aligned} \quad (4.44c)$$

wiederum mit $\omega_{1/2}^2 = \omega_{1b}^2 - \gamma_{1/2}^2$ (Gl.(3.29)). Regt man das System wieder mit einem Wellenpaket der Form (4.34) an ($t_0=0, M=0$), erhält man wieder:

die Gleichtaktschwingung für $-\Delta t \leq t \leq \Delta t$:

$$\langle x_a(t) \rangle + \langle x_b(t) \rangle \approx -\frac{\alpha \delta}{4\gamma_s} \cos \omega_1 t [1 - e^{-\gamma_1(t+\Delta t)}] + \frac{\alpha \delta}{2} (t + \Delta t) \cos \omega_2 t \quad (4.45a)$$

und für $t \geq \Delta t$:

$$\langle x_a(t) \rangle + \langle x_b(t) \rangle \approx -\frac{\alpha \delta}{4\gamma_s} \cos \omega_1 t e^{-\gamma_1(t-\Delta t)} + \frac{\alpha \delta}{2\gamma_s} \cos \omega_2 t \quad (4.45b)$$

die Gegentaktschwingung für $-\Delta t \leq t \leq \Delta t$:

$$\langle x_a(t) \rangle - \langle x_b(t) \rangle \approx \frac{\alpha \gamma_s}{\gamma_2 \omega_2} \sin \omega_2 t [1 - e^{-\gamma_2(t+\Delta t)}] \approx \frac{\alpha \gamma_s}{\omega_2} (t + \Delta t) \sin \omega_2 t \quad (4.45c)$$

und für $t \geq \Delta t$:

$$\langle x_a(t) \rangle - \langle x_b(t) \rangle \approx \frac{\alpha}{\omega_2} \sin \omega_2 t \quad (4.45d)$$

wobei Exponentialglieder mit $\gamma_2(t \pm \Delta t)$ in eine Reihe entwickelt und Terme der Ordnung δ^2 und ϵ^2 vernachlässigt wurden. Man sieht wieder, daß während des Einschwingvorganges $-\Delta t \leq t \leq \Delta t$ die Anwachsrate der Mode 1 die Größe der Amplitude bestimmt, somit über die Mode 1 die eingestrahelte Energie absorbiert, und über die Modenkopplung die Mode 2 angeregt wird. Für Zeiten $t > \Delta t$ (Gl.(4.45b,d)) zeigt die Mode 1 wieder einen rasch zerfallenden Anteil, während die Mode 2 über einen langen Zeitraum ($t \lesssim 10^4/\gamma_s$) im Standardbeispiel praktisch konstant bleibt. Im Unterschied zum einfach

angeregten System ist aber die Amplitude des dissipativen Anteils klein im Verhältnis zu der der Mode 2 ($A_{66}/A_{66} \approx \frac{\epsilon}{2} \approx 2.5 \cdot 10^{-3}$ im Standardbeispiel), so daß die absorbierte Energie fast vollständig in der langlebigen Mode 2 enthalten ist. Diese Energie kann z.B. wieder über Dipolstrahlung kohärent ($t_c = 1/2\chi_2$) emittiert werden, so daß das System praktisch keine Dissipation mehr zeigt. Bei Einstrahlung vieler Wellenpakete über einen langen Zeitraum $2t$ erhält man mit den Gln.(3.36), (4.16), (4.40) und (4.41) für $s=-1$:

$$\Delta E = \frac{m^2 a^2}{8} \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega \Phi^+(\omega) G(\omega)^2 \left[-\epsilon^2 \chi_1''(\omega) + (4+\epsilon^2) \chi_2''(\omega) + \frac{\epsilon^2 \omega}{\sqrt{S_3}} (\chi_2'(\omega) - \chi_1'(\omega)) \right] \quad (4.46)$$

$$\Delta E \approx \frac{1}{2} m^2 a^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega \Phi^+(\omega) G(\omega)^2 \chi_2''(\omega)$$

In erster Näherung ergibt so die Integration:

$$\Delta E \approx \frac{1}{4} m a^2 \Phi^+(\omega_2) \quad (4.47)$$

Im Vergleich zur absorbierten Energie der ungekoppelten Moden

$$\begin{aligned} \Delta E_0 &= \frac{1}{4} m^2 a^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega G(\omega)^2 \Phi^+(\omega) [\chi_{aa}''(\omega) + \chi_{bb}''(\omega)] \\ &\approx \frac{1}{2} m^2 a^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega G(\omega)^2 \Phi^+(\omega) \chi_{aa}''(\omega) = \frac{1}{4} m a^2 \Phi^+(\omega_2) \end{aligned} \quad (4.48)$$

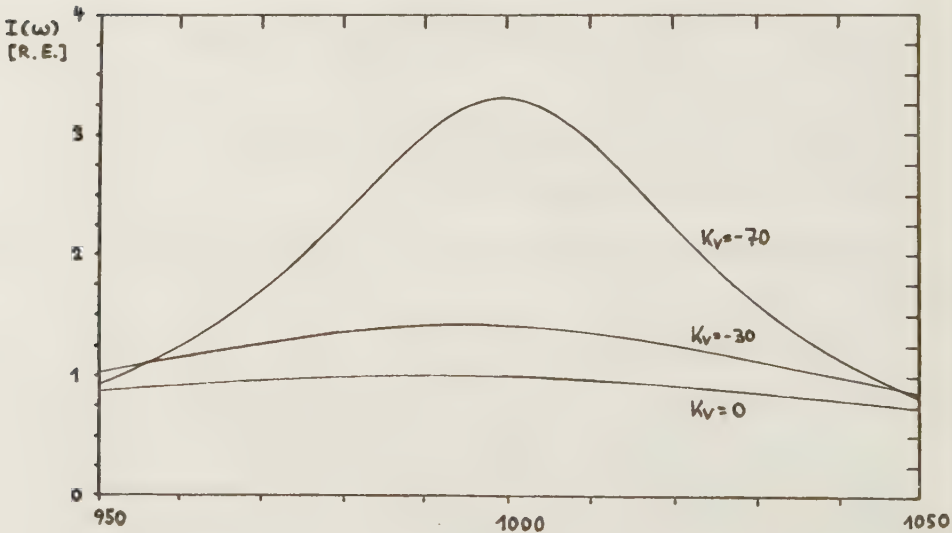


Bild 31a): Gesamtabsorptionsprofil $I(\omega) = I_{aa}(\omega) - 2 I_{ab}(\omega) + I_{bb}(\omega)$ für zwei im Gegentakt angeregte Moden bei verschiedenen Kopplungsstärken. Werte wie in Bild 29.

sieht man, daß in erster Näherung die gesamte absorbierte Energie in der Mode 2 enthalten ist, und die Dissipation damit vernachlässigt werden kann. Die spektrale Verteilung der absorbierten Energie bzw. Leistung läßt sich durch das Absorptionsprofil

$$I(\omega) = I_{aa}(\omega) - 2I_{ab}(\omega) + I_{bb}(\omega) \quad (4.49)$$

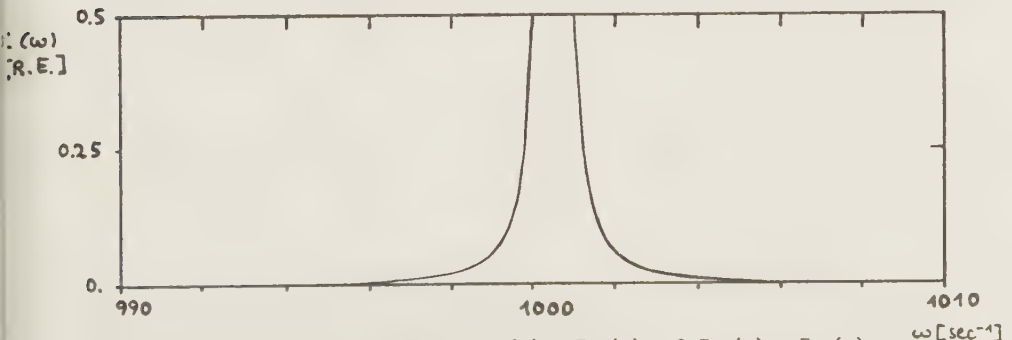
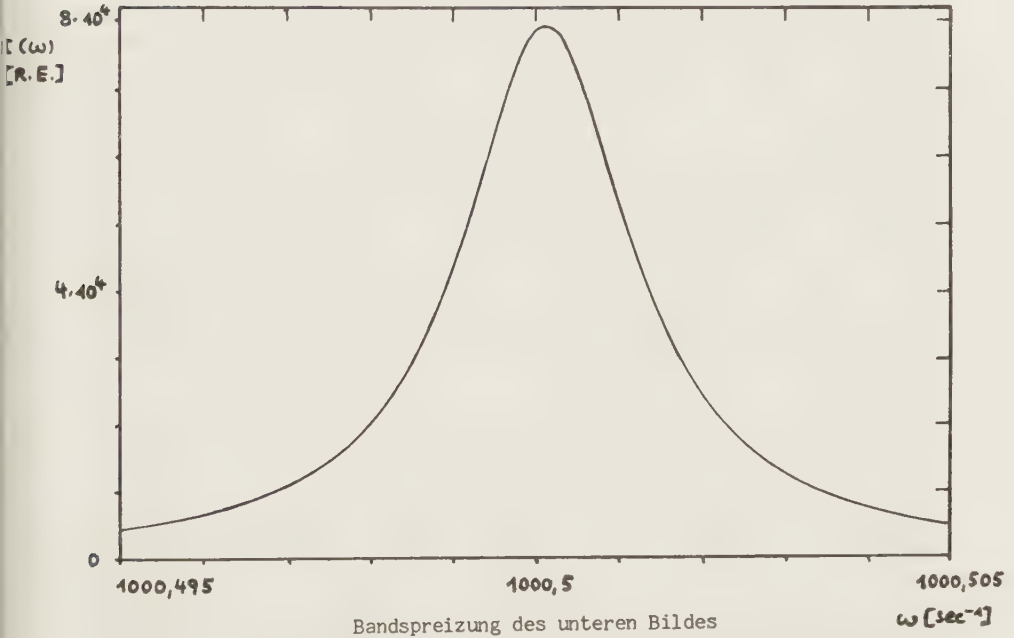


Bild 31b): Gesamtabsorptionsprofil $I(\omega) = I_{aa}(\omega) - 2I_{ab}(\omega) + I_{bb}(\omega)$ für zwei im Gegentakt angeregte Moden bei $K_V = -100 \text{ sec}^{-1}$

nach Gl.(3.27) beschreiben. In Bild 31a) und 31b) ist $I(\omega)$ für das Standardbeispiel bei verschiedenen Kopplungsstärken K_V aufgetragen. Man sieht, daß das Absorptionsmaximum im Vergleich zum einfach angeregten System (Bild 17) für große Kopplung etwa den doppelten Wert erreicht. Dabei ist aus den Bildern 17 und 18 zu sehen, daß nun die Mode 1 praktisch keinen Beitrag mehr gibt, während sie beim einfach angeregten System für einen breiten Hintergrund im Absorptionsprofil sorgt. Bei im Gegentakt angeregten Systemen bestimmt also nur die Mode 2 das Absorptionsverhalten und damit auch das Emissionsverhalten, wie es oben schon gezeigt wurde. Besonders deutlich sieht man dies für optimale Kopplung $K_V = -\gamma_S$ (Bild 31b). Die Absorption ist nur im einem schmalen Band um $\omega \approx \omega_2$ von Null verschieden, erreicht aber eine Höhe in dem gewählten Beispiel, die etwa um den Faktor 10^5 größer ist als im entkoppelten Zustand. Vergleicht man Bild 31b) mit dem Profil des einfach angeregten Systems bei derselben Kopplungsstärke (Bilder 22 und 25), sieht man, daß der breite Hintergrund verschwunden ist, der durch die Mode 1 verursacht wird. Ebenso verschwindet der Dämpfungseinbruch bei $\omega = \omega_b$, da dieser durch den Beitrag von $I_{bb}(\omega)$ an dieser Stelle aufgehoben wird. Entsprechend gilt dies an der Stelle $\omega = \omega_a$.

Durch Anregung im Gegentakt läßt sich also im dissipativen System ein langlebiger Zustand erzeugen, bei dem sich fast die gesamte absorbierte Energie in einem sehr schmalen Frequenzband befindet, wenn es gelingt, die Kopplung K_V auf ihren Grenzwert $-\gamma_S$ zu bringen. Betrachtet man eine Anordnung, wie sie in Bild 1 vorliegt, kann dies sicher nicht erreicht werden, da nur Badteilchen zwischen den Oszillatoren eine Kopplung bewirken können. Badteilchen, die sich im Außenraum befinden, verursachen immer eine Dissipation, so daß die optimale Kopplung nie erreicht werden kann. Auch eine regellose Anordnung dieser "Elementarzellen" in einem Volumen führt aus denselben Gründen dazu, daß der Grenzwert nie erreicht werden kann. Um $K_V = -\gamma_S$ zu erreichen, muß man daher fordern, daß die gekoppelten Oszillatorpaare geordnet sind, das System also "konditioniert" ist. Dazu kann man sich folgendes Modell vorstellen, wie es in Bild 32 dargestellt ist:

In einem Neutralgas befinden sich Gasmoleküle, die ein permanentes Dipolmoment besitzen. Durch Anlegen etwa eines äußeren Gleichfeldes läßt sich erreichen, daß sich die Moleküle ausrichten, und entgegengesetzte Ladungen einander gegenüberliegen. Strahlt man nun in dieses "konditionierte" Medium ein elektrisches Feld ein, bewegt sich das Teilchen

" a_n " im Potential von " b_{n-1} ", und das Teilchen " b_n " im Potential von " a_{n+1} " usw., wobei " a_n " und " b_n " in entgegengesetzter Richtung ausgelenkt werden. Da das äußere Feld schwach ist im Vergleich zu den inneren Feldern, ist die Auslenkung gering, die inneren Potentiale können näherungsweise als harmonisch angesehen werden. Zwischen den Dipolen befindet sich das Neutralgas, das als Wärmebad angesehen werden kann. Die Abstände der Dipole sollen im Bereich der freien Weglänge des Neutralgases sein. Damit kann die intermolekulare Wechselwirkung zwischen den Oszillatormolekülen gegenüber der intramolekularen vernachlässigt werden, außer daß sie zu einer geringen Verschiebung der Eigenfrequenzen der Moden führen kann. Die Eigenfrequenzen der Moden sind die quantenmechanischen Übergangsfrequenzen der Dipolmomente (in Bild 32 etwa die der Streckschwingung und der Translation), die z.B. mit SCF-Methoden [45,46] berechnet werden können (SCF- (Self-Consistent-Field-) Kalkül: Methode zur Berechnung von Potentialen und Wellenfunktionen von Vielteilchensystemen in der Hartree-Fock-Näherung). Da nur die Mittelwerte $\langle x_a(t) \rangle$ und $\langle x_b(t) \rangle$ von Interesse sind, und für sie nach dem Ehrenfest-Theorem die klassischen Bewegungsgleichungen gelten, lassen sich die Moden "a" und "b" als klassische Teilchen behandeln. Ebenso läßt sich die Wechselwirkung mit dem Badgas als klassischer Stoßprozeß behandeln. Die Voraussetzungen sind also gegeben, mit denen dieses Modell mit dem seither entwickelten Formalismus behandelt werden kann. Das Modell läßt sich erweitern auf mehratomige Moleküle, die entweder ein permanentes Dipolmoment oder eine große Polarisierbarkeit besitzen. Ebenso kann an eine Anwendung bei Fremdioneneinschlüssen in Festkörpern gedacht werden, wobei das Phononengas die Rolle des Bades übernimmt. Dabei muß aber untersucht werden, inwieweit schon quantenmechanische Effekte eine Rolle spielen.

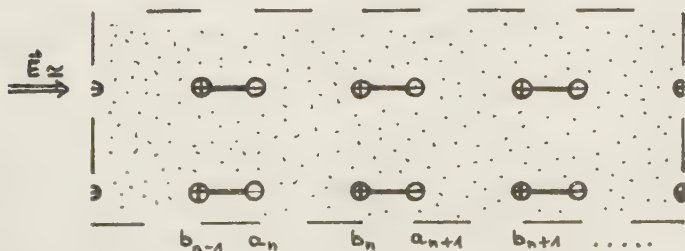


Bild 32: Ausrichtung von Dipolen zur Anregung einer Gegentaktschwingung

Nach den vorangegangenen Betrachtungen lassen sich nun die Absorptionsprofile in Bild 31 auch als Emissionsprofile verstehen. Will man die Ausgangsleistung des Systems berechnen, muß man berücksichtigen, daß durch die stochastischen Kräfte (Bad-Wechselwirkung) eine zusätzliche Leistung, die Rauschleistung N_r , emittiert wird, so daß man für die abgegebene Leistung erhält:

$$N_a = N_e + N_r \quad (K_V = -\gamma_S), \quad N_a^0 = N_e^0 + N_r^0 \quad (K_V = 0) \quad (4.50)$$

wobei N_e bzw. N_e^0 die durch die Zeitdauer der Einstrahlung 2τ dividierten Eingangsenergien von Gl.(4.46) bzw. (4.48) sind.

Man erhält für die Rauschleistung im Falle verschwindender Kopplung (Anhang A5):

$$N_r^0 = 4m\gamma_S 2T \int \frac{d\omega}{2\pi} 2\omega \chi''_{aa}(\omega) \quad (4.51a)$$

wobei wieder $\chi''_{aa}(\omega) \approx \chi''_{bb}(\omega)$ gesetzt wurde, und für optimale Kopplung $K_V = -\gamma_S$:

$$N_r = 4m\gamma_S 2T \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega (2\chi''_1(\omega) - \frac{\gamma^2}{2} \chi''_2(\omega)) \quad (4.51b)$$

mit $\chi''_1(\omega)$ und $\chi''_2(\omega)$ aus Gl.(3.16), wobei zur Ableitung das Nyquist-Theorem [38] für die Kopplung $K_V = -\gamma_S$

$$\langle f_i(\omega) f_j(\omega') \rangle = \frac{1}{m} 8\pi\gamma_S kT \delta(\omega + \omega') \quad (i, j=1, 2) \quad (4.52)$$

benutzt wurde. Integriert man die Rauschleistungen über das ganze Frequenzband von $\omega=0$ bis $\omega=\infty$, erhält man:

$$N_r = N_r^0 = 2\gamma_S kT \quad (4.53)$$

Berechnet man nun mit den Gln.(4.46), (4.48), (4.50) und (4.51) die Ausgangsleistung in einem schmalen Frequenzband von $\omega_2 - \gamma_2$ bis $\omega_2 + \gamma_2$, erhält man:

$$\begin{aligned} \text{ungekoppelt:} \quad \bar{N}_a^0 &= \frac{\gamma_2}{2\gamma_S} \left(\frac{m a^2 \phi^4}{16\tau} + 2\gamma_S kT \right) \\ \text{gekoppelt:} \quad \bar{N}_a &= \frac{m a^2 \phi^4}{32\tau} + 0.1 \frac{\gamma_2}{\gamma_S} \gamma_S kT \end{aligned} \quad (4.54)$$

wobei man mit

$$2\tau/\phi^4 \approx 2 \Delta t = 1/\gamma_S \quad \text{und} \quad Q = m a^2 / (16kT) \quad (4.55)$$

für den Quotienten der Ausgangsleistungen

$$\bar{N}_a / \bar{N}_a^0 = (\gamma_S / \gamma_2) Q / (1 + Q) \quad (4.56)$$

erhält. Dabei ist Q das Verhältnis von absorbiertener zu thermischer Energie des Oszillatorsystems. Da die absorbierte Energie praktisch vollständig in

der Gegentakmode enthalten ist, während die thermische Energie von der Gleichtakmode aufgenommen wird (Anhang A5), läßt sich aus der Stärke der Amplituden folgende Abschätzung machen (siehe S 91):

$$\frac{1}{2} \frac{A_{c0}^2}{A_{0c}^2} = m a^2 / (16 \pi T) = Q = \gamma_1 / \gamma_2 \gg 1 \quad (4.57)$$

Dies in Gl.(4.56) eingesetzt, ergibt unmittelbar:

$$\bar{N}_a = \gamma_1^2 2T / \gamma_2 \quad (4.58)$$

oder, da $\bar{N}_a$ die halbe Ausgangsleistung N_a des Bandes $0 \leq \omega < \infty$ ist (Gl.4.40):

$$N_a = 2 \gamma_1^2 2T / \gamma_2 \quad (4.59)$$

Setzt man für die Linienbreiten $\gamma_2 = 2\pi \delta\nu$ und $\gamma_1 = 2\pi \delta\nu$, erhält man aus obiger Gleichung:

$$\delta\nu = 4\pi (\delta\nu)^2 \frac{2T}{N_a} \quad (4.60)$$

Dies ist die bekannte Schawlow-Townes-Relation [44], die eine Beziehung zwischen der Linienbreite eines Masers und seiner Ausgangsleistung herstellt.

Damit gibt es eine unmittelbare Anwendung dieses Modells auf ein physikalisches Phänomen, nämlich das des Lasers. Wie es auf den letzten Seiten beschrieben wurde, findet bei Einstrahlung von inkohärenten Wellenpaketen in das System eine kohärente Abstrahlung mit einem hohen Verstärkungsfaktor statt, wenn die "Laser-Bedingung"

$$K_V = - \sqrt{\gamma_a \gamma_b} \quad (4.61)$$

erfüllt ist. Wie oben schon beschrieben, nimmt während des Absorptionsvorganges die Gleichtakmode 1 wesentlich mehr Energie auf als die Gegentakmode 2. Nach Beendigung des Absorptionsvorganges zerfällt die Mode 1 entsprechend ihrer Lebensdauer recht schnell, es findet aber ein Energietransfer auf die langlebige Mode 2 statt, so daß das System fast

keine Energie verliert. Entsprechend der Lebensdauer $t_c \sim 1/\gamma_2$ wird dann wieder diese Energie kohärent abgestrahlt, so daß man sich ein Energieschema wie im nebenstehenden Bild 33 vorstellen kann, das dem quantenmechanischen Energieschema eines Drei-Niveau-Lasers entspricht. Bei entsprechend hoher Einstrahlung erhält man eine kontinuierliche Abstrahlung mit hoher Ausgangsleistung, wie es in den Gln.(4.43), (4.47) und (4.59) zum Ausdruck kommt.

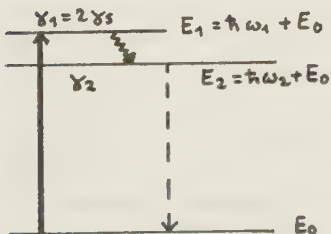


Bild 33: Anregungsniveaus des Lasers

Die Deutung des Lasers als klassischer Effekt ist nicht unbekannt [48,49,50], da die Kohärenz des Laserlichtes durch Kooperation der atomistischen bzw. molekularen Dipole verursacht wird, eines Vielteilchensystems also, dessen Verhalten durchaus klassisch begriffen werden kann [42]. Gleichwohl wurde der Versuch nicht unternommen, dieses Verhalten mit einem Modell zu erklären, in dem zwei Schwingungsmoden über die "Dissipationskopplung" K_V , wie man die Geschwindigkeitskopplung besser nennen sollte, miteinander wechselwirken. Durch die "Konditionierung" des Systems, d.h. die Ausrichtung der polaren Moleküle im Bad, wie es in Bild 32 dargestellt ist, entsteht der kooperative Effekt. Obwohl das Modell prinzipiell die Lasereffekte in allen Bereichen erklären kann, wenn Oszillator- und Badvariable richtig definiert werden, läßt es sich am besten auf Gaslaser, bei denen die aktiven Moleküle mit einem Fremdgas gemischt sind, oder auf Flüssigkeitslaser, wo z.B. fluktuierende Wasserstoffbrücken das Bad repräsentieren, anwenden, vor allem, wenn man eine Abstrahlung im fernen Infrarot erhält (FIR-Laser). Abgesehen von der Optimierung äußerer Gerätedaten, die dieses Modell natürlich nicht liefern kann, lassen sich über die Laserbedingung (4.61) geeignete Gasgemische und Mischungsverhältnisse finden, die Lasereffekte zeigen. Dabei müssen die Dämpfungskonstanten γ_a und γ_b und die Kopplung K_V , die ja die Summe der Wechselwirkungen Oszillator-Badteilchen bzw. die der Wechselwirkungen (Mode "a" - Bad - Mode "b") beschreiben, über quantenmechanische Methoden berechnet werden, wobei sich für Flüssigkeiten und Gase vor allem das SCF-Kalkül [43,46] anbietet. Damit lassen sich für unterschiedliche Konfi-

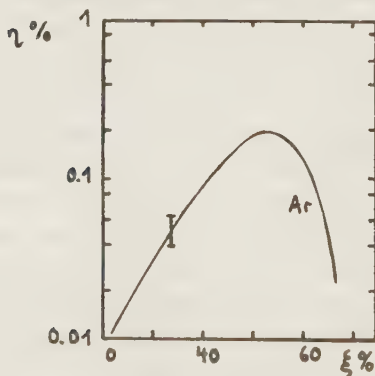


Bild 34: Konzentrationsabhängigkeit der Laser-Effektivität

(aus [51]).

gurationen und Mischungen die Überlappungsintegrale für die jeweiligen Wechselwirkungen berechnen, die letztlich die einzelnen Summanden zur Bestimmung der Dämpfungen und der Kopplung (Gl.(2.45)) bilden. Anhand der Laserbedingung (4.61) läßt sich dann prüfen, welche Anordnungen des des Lasermaterials und des Bades optimal sind. Genauere Berechnungen hierzu sind notwendig, andererseits aber sehr aufwendig, so daß sie im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt werden konnten.

Wie schon in Kapitel II gesagt wurde, ist zu erwarten, daß die Stärke der Kopplung abhängig ist von der mittleren freien Weglänge des Badgases, also vom Partialdruck und damit von der Konzentration. Bild 34 zeigt eine solche Abhängigkeit für einen CO-gasdynamischen Laser, der aus einer Mischung von CO und Argon besteht [51]. Da die Kopplungskonstante und die Dämpfungen noch temperaturabhängig sind, verwendet man als Badgas in der Praxis Gasgemische, die über einen breiteren Bereich eine Temperaturkonstanz zeigen [51,52].

Um eine wesentliche Verstärkung zu erreichen, ist es notwendig, die Laserbedingung sehr genau einzuhalten. Bild 35 zeigt die Zunahme der Intensität für $\omega = \omega_2 \approx \sqrt{\Omega_2}$ bei leicht verstimten Oszillatoren (vgl. Bild 18). Man bemerkt, daß für eine 10%-ige Abweichung der Kopplung von der Laserbedingung die Verstärkung nur noch 10 beträgt, während sie im Maximum den Wert $8 \cdot 10^4$ hat. Der Lasereffekt ist also ebenso wie das Auftreten des Dämpfungseinbruches (Bild 29 und IV.3) sehr scharf an die Einhaltung der Laserbedingung (4.61) gekoppelt.

Zur experimentellen Bestimmung der Lasereigenschaften läßt sich noch das Rauschverhalten des Lasers heranziehen. Aus der Formel für die Rauschleistung im gekoppelten Zustand (4.51b) läßt sich zeigen, daß diese bei der Laserfrequenz $\omega_2 \approx \sqrt{\Omega_2}$ ähnlich wie beim Dämpfungseinbruch (Gleichtaktanregung, Bild 29) verschwinden muß, wenn man sich in einem Bereich befindet, in dem die klassische Näherung erlaubt ist ($\hbar\omega \ll kT$). Nimmt man von (4.51) den Quotienten der Rauschleistung über ein Frequenzband der Breite $2n\gamma_2$ um den Frequenzschwerpunkt ω_2 im gekoppelten

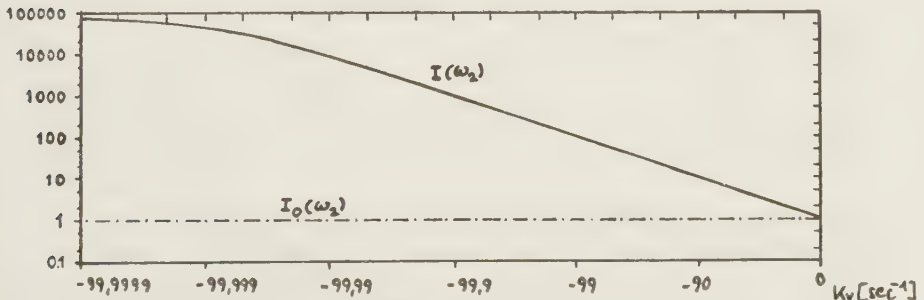


Bild 35: Relative Intensität in Abh. von der Dissipationskopplung K_V

$$\omega = \omega_2 \approx \sqrt{\Omega_2}, \omega_a = 1001 \text{ sec}^{-1}, \omega_b = 1000 \text{ sec}^{-1}, \gamma_a = \gamma_b = 100 \text{ sec}^{-1}$$

Für andere Parameterwerte zeigt die Kurve qualitativ denselben Verlauf

und der Rauschleistung im ungekoppelten Zustand, gemessen über eine Breite $2\gamma_s$ ($\gamma_a = \gamma_b = \gamma_s$), erhält man:

$$\frac{N_F \pi}{N_F^0} = \left(\frac{n}{4} - \frac{\pi}{8} + \frac{1}{8} \arctan \frac{2n}{n^2 - 1} \right) \left(\frac{\omega_a - \omega_b}{\gamma_s} \right)^2 \quad n > 1 \quad (4.62a)$$

$$\frac{N_F \pi}{N_F^0} = \left(\frac{1}{4} - \frac{\pi}{32} \right) \left(\frac{\omega_a - \omega_b}{\gamma_s} \right)^2 \quad n = 1 \quad (4.62b)$$

Dies ist in Bild 36 für verschiedene n aufgezeichnet. Man sieht, daß die relative Rauschleistung quadratisch mit der Differenz der ungekoppelten Eigenfrequenzen wächst und für exakte Resonanz $\omega_a = \omega_b$ verschwindet. Daraus läßt sich ersehen, daß für eine Konfiguration, die die Laserbedingung erfüllt, die Rauschleistung in der Umgebung der Laserfrequenz deutlich absinkt, daß hier also eine Senke im Rauschspektrum zu bemerken ist. Für eine Kopplung, die die Laserbedingung nicht exakt erfüllt, gelten die Gln.(4.62) nicht mehr, da dann die Rauschleistung anwächst und auch für exakte Resonanz nicht mehr verschwindet. Solange man aber in der Nähe der Laserbedingung bleibt, etwa im waagerechten Bereich von Bild 35, kann man trotzdem einen Rauscheinbruch in der Umgebung der Laserfrequenz sehen.

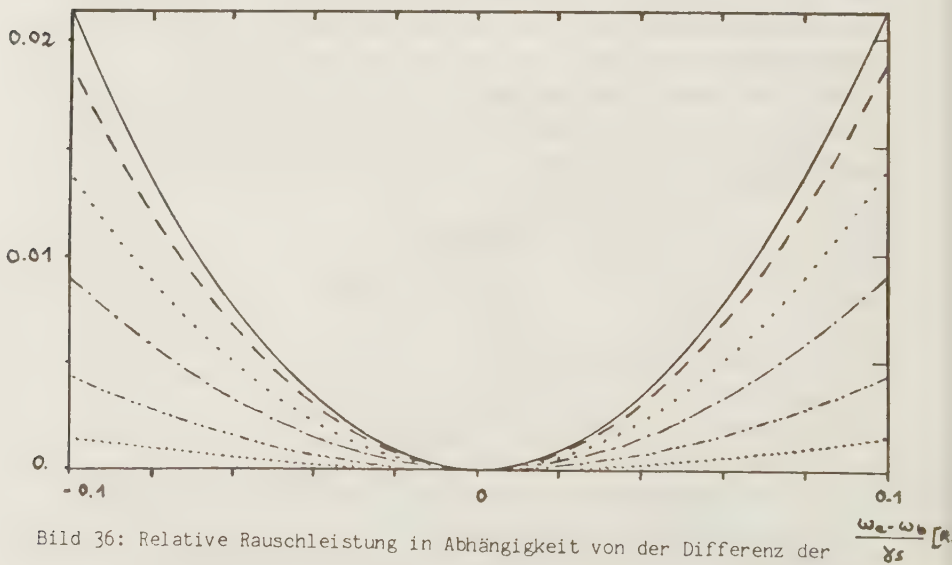


Bild 36: Relative Rauschleistung in Abhängigkeit von der Differenz der ungestörten Eigenfrequenzen bei Erfüllung der Laserbedingung.

$n = 1$, $n = 3$ -.- , $n = 5$ -.-.- , $n = 7$. . .
 $n = 9$ - - - , $n = 10$ —

Damit läßt sich experimentell die Lasereigenschaft einer Substanz oder eines Gemisches feststellen, ohne daß man ein äußeres Feld einstrahlen muß, indem man die relative Rauschleistung über ein breites Frequenzband mißt und prüft, ob ein Einbruch im Spektrum existiert.

Damit ist nun gezeigt, daß in Systemen, die im Gegentakt angeregt werden und über die Dissipationskopplung wechselwirken, bei Erreichen der Laserbedingung (4.61) kooperative Effekte auftreten, die zum Lasern des Systems führen.

IV.5 Zusammenfassung des Kapitels

Mit den in Kapitel III erhaltenen zeitabhängigen Responsefunktionen wurden für Kraftstöße und periodische Kräfte Lösungen der Bewegungsgleichungen berechnet. Es zeigt sich, daß vor allem bei leicht verstimmtten Oszillatoren, die mit einer monochromatischen Welle im Gleichtakt angeregt werden, Dämpfungseinbrüche im Absorptionsspektrum auftreten können. Bei im Gegentakt angeregten Systemen, die nicht lagegekoppelt sind, kommt es bei Anwachsen der Dissipationskopplung zur Ausbildung von kooperativen Effekten. Dabei werden inkohärent eingestrahelte Wellenpakete kohärent in einem engen Frequenzband abgestrahlt, was die typische Eigenschaft des Lasers oder Masers ist. Dabei ist zur Erreichung dieses Zustandes folgendes wichtig:

1.) Die Konditionierung des Mediums, d.h. die Ausrichtung der Dipole.

2.) Einhalten der Laserbedingung $K_V = -\sqrt{8\alpha\beta}$.

Der Vergleich der abgestrahlten Leistung mit der Rauschleistung führt zu der Schawlow-Townes-Relation.

Bei der Rauschleistung läßt sich, sofern die klassische Näherung gültig ist, ein Einbruch im Spektrum in der Umgebung der Laserfrequenz beobachten.

Kopplungskonstante und Dämpfungen lassen sich über SCF-Rechnungen bestimmen, so daß man sich bei der Berechnung der Lasereigenschaften nicht unbedingt auf den klassischen Bereich beschränken muß.

V.) Zusammenfassende Diskussion der Ergebnisse

Für ein System von klassischen Oszillatoren, die in Verbindung stehen mit einem Wärmebad, wurde eine Hamiltonfunktion für das System "Oszillatoren + Bad" formuliert, die die Energie des Gesamtsystems beschreibt und nicht explizit zeitabhängig ist. Nimmt man an, daß zwischen den Oszillatoren und den einzelnen Badteilchen nur schwache Wechselwirkungen stattfinden, läßt sich in den kanonischen Bewegungsgleichungen eine Linearisierung in den Oszillatorkoordinaten erreichen und die Wechselwirkung mit dem Wärmebad parametrisieren. Nimmt man ferner an, daß sich die Wechselwirkungen im Bad durch Gauß-Markoff-Prozesse beschreiben lassen, und betrachtet man im Unterschied zu der in der Literatur üblichen Vorgehensweise das Verhalten eines Systems von Oszillatorpaaren im Wärmebad, führt diese Parametrisierung dazu, daß man in den Bewegungsgleichungen für die Oszillatorpaare Terme proportional zu den Geschwindigkeiten der Oszillatoren bekommt, die einerseits die Dämpfungen bestimmen, zum andern eine geschwindigkeitsabhängige Kopplung bewirken, die zusätzlich zu einer eventuellen lageabhängigen Kopplung wirkt (Bewegungsgln.(2.86)). Die Dämpfungskonstanten γ_a und γ_b sowie die Geschwindigkeitskopplungskonstante K_v zeigen eine Abhängigkeit von den Eigenfrequenzen der Oszillatoren, die im Experiment verifiziert werden kann. Daneben zeigt sich für K_v noch eine Abhängigkeit von der Distanz beider Oszillatoren und der Dichte der Badteilchen. Diese Abhängigkeit bedeutet, daß es eine Grenze für die Stärke der Kopplung gibt, die durch die Beziehung

$$0 \leq K_v \leq -\sqrt{\gamma_a \gamma_b} \quad (5.1)$$

bestimmt wird. Für dieses gekoppelte System lassen sich nun mit Hilfe der Linear-Response-Theorie [38,39,40] die Absorptionsprofile und das zeitliche Verhalten der Oszillatormoden unter dem Einfluß einer äußeren Kraft berechnen. Man erhält in Abhängigkeit von den Kopplungen veränderte Eigenfrequenzen und Dämpfungskonstanten. Mit diesen Parametern läßt sich das Absorptionsprofil in zwei lorentzartige Teilprofile zerlegen, von denen das eine der Gleichtaktmode

$$\langle x_a(t) \rangle + \langle x_b(t) \rangle, \quad (5.2)$$

das andere der Gegentaktmode

$$\langle x_a(t) \rangle - \langle x_b(t) \rangle \quad (5.3)$$

zugeordnet werden kann. Es zeigt sich dabei, daß die Lagenkopplung keine qualitative Änderung des Systems bewirkt.

Der Einfluß der Geschwindigkeitskopplung bewirkt jedoch, daß sich im System mit zunehmender Kopplungsstärke $|K_V|$ ein Zustand herausbildet, der nur schwach gedämpft ist und damit eine lange Lebensdauer besitzt. Dieser Effekt zeigt sich besonders stark, wenn sich Eigenfrequenzen und Dämpfungen des ungekoppelten Systems nur wenig voneinander unterscheiden, und $|K_V|$ in der Nähe der idealen Kopplungsstärke $\sqrt{\gamma_a \gamma_b}$ ist. Untersucht man das Zeitverhalten des Systems, bemerkt man, daß mit wachsendem $|K_V|$ unabhängig von der Art der Anregung zunehmend die Gegentakmode (5.3) das Verhalten bestimmt, während die Gleichtakmode (5.2) stark gedämpft ist und nichts mehr zur Dynamik des Systems beiträgt. Dies hat seine Ursache darin, daß in der Gegentakmode bei maximalem $|K_V|$ fast die gesamte Energie, die von der Mode "a" durch Wechselwirkung an das Bad abgegeben wird, wieder vom Bad auf die Mode "b" übertragen wird und umgekehrt, so daß durch diese stochastische Kopplung die Gegentakmode fast nicht gedämpft ist und damit keine Energie verliert, während sich das System in der Gleichtakmode wie ein gedämpfter Oszillator verhält.

Dieses Verhalten des Systems läßt sich durch eine besondere Anordnung der Oszillatoren und durch die richtige Wahl der Partialdrucke der Oszillatoren und des Badgases erreichen, d.h. durch die "Konditionierung", wie sie im Abschnitt IV.4 beschrieben ist (siehe dazu Bilder 32 und 33). Bei Einstrahlung von Wellen in der Nähe der Frequenz $\omega_c = \sqrt{(\omega_a^2 + \omega_b^2)}/2$, erhält man folgendes Verhalten:

i) Bei Anregung im Gleichtakt mit einer monochromatischen Welle (beide Moden werden in gleicher Phase angeregt) erkennt man im Absorptionsprofil an der Stelle $\omega = \omega_c$ einen Dämpfungseinbruch, d.h. die Absorption verschwindet dort. Man erkennt aus dem Zeitverhalten des Systems, daß sich die Gegentakmode ausbildet, wobei im eingeschwungenen Zustand die Mode "a" in Phase, die Mode "b" in Gegenphase zur eingestrahlten Welle ist. Damit absorbiert das System keine Leistung, es oszilliert aber dämpfungsfrei (Abschnitt IV.3). Für eine nichtideale Kopplung erhält man zwar keine Nullstelle im Absorptionsprofil, der Dämpfungseinbruch läßt sich aber noch beobachten. Anwendbar ist diese Beschreibung auf intermolekulare Wechselwirkung bei langkettigen organischen Molekülen [40]. Wird das Verhalten des Systems überwiegend durch quantenmechanische Effekte bestimmt, dürfte dieser Dämpfungseinbruch verschwinden. Genauere Untersuchungen sind hier allerdings noch notwendig.

ii) Bei Anregung im Gegentak durch inkohärente Strahlung (beide Moden werden in entgegengesetzter Phase angeregt) bildet sich wieder eine

Gegentaktschwingung heraus, wobei die Phase der Mode "a" um etwa $\pi/2$ und die von "b" um $-\pi/2$ gegenüber der eingehenden Welle verschoben ist. Damit wird eine hohe Absorption der eingestrahnten Leistung erreicht, wobei diese umso höher ist, je kleiner die Differenz der Eigenfrequenzen und je größer die Dämpfungen des ungekoppelten Systems sind. Gleichzeitig verkleinert sich die Halbwertsbreite im Profil, da das Produkt aus Absorptionsmaximum und Halbwertsbreite etwa konstant ist. Dies bedeutet, daß bei Einstrahlung von Wellenpaketen das System eine fast monochromatische Welle mit einer um mehrere Ordnungen größeren Kohärenzlänge als die der eingestrahnten Wellenpakete emittiert, so daß dieses Modell das Verhalten eines Lasers beschreibt. Da im Rahmen des Modells das Rauschverhalten des Systems berechnet werden kann, läßt sich aus dem Vergleich der Ausgangsleistung und der Rauschleistung die Schawlow-Townes-Formel [44] ableiten, sofern man sich auf den klassischen Bereich beschränkt. Damit wurden in diesem Modell die Laserbedingungen

$$K_V = -\sqrt{\gamma_a \gamma_b} + \text{Konditionierung}$$

formuliert, wie sie in der Literatur noch nicht gefunden wurden, und die es möglich machen, aus makroskopischen Parametern Optimierungskriterien für einen Laser aufzustellen, wobei in diesem Modell äußere Geometrien und Anordnungen der Geräte nicht eingingen. Anwenden läßt sich dieses Modell vor allem auf FIR-Laser und Hochtemperatur-IR-Laser, bei denen die klassische Näherung gültig ist. Da dazu noch das Rauschspektrum des Lasers berechnet werden kann, das für die Laserfrequenz eine Senke hat (Bild 36), läßt sich ohne Einstrahlung eines Feldes für eine Anordnung prüfen, ob diese Lasereigenschaften besitzt.

Dieses Modell bietet Erweiterungsmöglichkeiten dadurch, daß man höhere Ordnungen in dem Näherungsverfahren von Kap.II berücksichtigt und allgemeinere Potentiale als das harmonische berücksichtigt, wodurch sich zeitabhängige Dämpfungen und Kopplungen ergeben, die insgesamt zu nichtlinearen Bewegungsgleichungen führen, deren Lösungen man mit bekannten Verfahren berechnen kann. Außerdem kann man auch die Voraussetzungen fallen lassen, daß Wechselwirkungen im Bad durch Gauß-Markoff-Prozesse beschrieben werden, so daß man das Spektrum der Anwendungsmöglichkeiten wesentlich erweitern kann. Auch in einem quantisiertem System, das aus dem klassischen in kanonischer Weise hervorgeht, läßt sich dieses Rechenverfahren durchführen, was zur Verdeutlichung des Begriffs der Dissipation in gekoppelten quantenmechanischen Systemen führen mag.

Anhang

A1 Verifizierung der Lösung (2.22) für $g_{xi}(t)$

Mit $q_{xi}(t) = q_{xi}^0(x_i^0(t), p_i^0(t))$

$$+ \int_{t_0}^t dt' e^{iL_B^0(t-t')} [PK^i(q_{xi}, t') + \sum_j \int_{t_0}^{t'} dt'' \{q_{xi}(t'), PK^j(H_B, t'')\}]$$

den Bewegungsgleichungen (Gl. (2.17)):

$$\dot{q}_{xi}^0(t) = iL_B^0 q_{xi}^0(x_i^0(t), p_i^0(t))$$

$$\frac{d}{dt} e^{iL_B^0(t-t')} A(t') = e^{iL_B^0(t-t')} \{A(t'), H_B^0\} = iL_B^0 e^{iL_B^0(t-t')} A(t')$$

und der Hamiltonfunktion

$$H_B(\vec{x}, \vec{p}) = H_B^0(\vec{x}^0, \vec{p}^0) + H_B^I(t) = H_B^0(\vec{x}^0, \vec{p}^0) + \sum_j \int_{t_0}^t dt' PK^j(H_B, t')$$

erhält man durch Differentiation nach der Zeit:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q_{xi}(t) &= iL_B^0 q_{xi}^0(x_i^0(t), p_i^0(t)) + \int_{t_0}^t dt' \frac{d}{dt'} e^{iL_B^0(t-t')} [\dots] \\ &\quad + PK^i(q_{xi}, t) + \sum_j \int_{t_0}^t dt' \{q_{xi}(t'), PK^j(H_B, t')\} \\ &= iL_B^0(q_{xi}^0(x_i^0(t), p_i^0(t)) + \int_{t_0}^t dt' e^{iL_B^0(t-t')} [\dots]) \\ &\quad + PK^i(q_{xi}, t) + \{q_{xi}(t), \sum_j \int_{t_0}^t dt' PK^j(H_B, t')\} \\ &= iL_B^0 q_{xi}(t) + PK^i(q_{xi}, t) + \{q_{xi}(t), H_B^I(t)\} \end{aligned}$$

Wegen der Eigenschaft (2.13) des Liouville-Operators erhält man

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q_{xi}(t) &= \{q_{xi}(t), H_B^0 + H_B^I(t)\} + PK^i(q_{xi}, t) \\ &= \{q_{xi}(t), H_B(t)\} + PK^i(q_{xi}, t) \end{aligned}$$

Damit erhält man aus der Zeitableitung von (2.22) die Bewegungsgleichung (2.19), $g_{xi}(t)$ von (2.22) ist also die Lösung der Bewegungsgleichung.

A2 Umformung der Integrale in Gl.(2.36)

Mit $S_{\beta\gamma}^{ij}(t, t') = \langle g_{\beta i}^0(t) g_{\gamma j}^0(t') \rangle_{H_0} = C_{\beta\gamma}^{ij} \delta(t-t')$ gelten die Symmetrierelationen:

$$S_{\beta\gamma}^{ij}(t, t') = S_{\gamma\beta}^{ji}(t', t), \quad C_{\beta\gamma}^{ij} = C_{\gamma\beta}^{ji}$$

$S_{\beta\gamma}^{ij}(t-t')$ ist also eine symmetrische Funktion in der Zeit. Betrachtet man z.B. das Integral

$$I = \int_{t_0}^t dt' p_a(t') \frac{\partial^2}{\partial t^2} S_{\beta\gamma}^{ij}(t, t')$$

läßt sich die untere Grenze nach $-\infty$ verschieben, da die Wechselwirkung bei $t=t_0$ adiabatisch einsetzt, und $p_a(t')$ mit seinen Ableitungen an dieser Stelle verschwindet. $p_a(t')$ läßt sich über das ganze Intervall $(-\infty, \infty)$ definieren, wenn man den Integrationsbereich durch die Stufenfunktion einschränkt. Insgesamt erhält man für I mit den Substitutionen $t'=t \pm \tau$:

$$I = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau p_a(t-\tau) \theta(\tau) \frac{\partial^2}{\partial t^2} S_{\beta\gamma}^{ij}(t, \tau) + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau p_a(t+\tau) \theta(-\tau) \frac{\partial^2}{\partial t^2} S_{\beta\gamma}^{ij}(t, \tau)$$

was sich weiter umformen läßt:

$$I = \frac{1}{4} C_{\beta\gamma}^{ij} \int d\tau [p_a(t+\tau) + p_a(t-\tau)] (\theta(\tau) + \theta(-\tau)) \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta(\tau) + \frac{1}{4} C_{\beta\gamma}^{ij} \int d\tau \operatorname{sgn} \tau [p_a(t-\tau) - p_a(t+\tau)] \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta(\tau)$$

mit $\theta(\tau) + \theta(-\tau) = 1$ und $\operatorname{sgn} \tau = \theta(\tau) - \theta(-\tau)$. Mit den Beziehungen:

$$\int f(\tau) \frac{\partial^n}{\partial \tau^n} \delta(\tau) d\tau = (-1)^n \frac{d^n}{d\tau^n} f(\tau) \Big|_{\tau=0}, \quad \frac{d}{d\tau} \operatorname{sgn} \tau = 2 \delta(\tau)$$

erhält man unmittelbar:

$$I = \frac{1}{4} C_{\beta\gamma}^{ij} \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} (p_a(t+\tau) + p_a(t-\tau)) + \operatorname{sgn} \tau \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} (p_a(t-\tau) - p_a(t+\tau)) - 2 \delta(\tau) \frac{\partial}{\partial t} (p_a(t-\tau) + p_a(t+\tau)) \right) \right]_{\tau=0}$$

$$I = \frac{1}{4} C_{\beta\gamma}^{ij} \left[\frac{d^2}{dt^2} (p_a(t+\tau) + p_a(t-\tau)) + \operatorname{sgn} \tau \cdot \frac{d^2}{dt^2} (p_a(t-\tau) - p_a(t+\tau)) + 2 \delta(\tau) \left(\frac{d}{dt} p_a(t-\tau) - \frac{d}{dt} p_a(t+\tau) \right) \right]_{\tau=0}$$

Damit verschwinden die beiden letzten Terme für $\tau=0$ und man bekommt insgesamt:

$$I = \int_{t_0}^t dt' p_a(t') \frac{\partial^2}{\partial t^2} S_{\beta\gamma}^{ij}(t, t') = \frac{1}{2} C_{\beta\gamma}^{ij} \ddot{p}_a(t)$$

Entsprechend kann man mit den anderen Termen in (2.36) verfahren und das Ergebnis zur weiteren Berechnung verwenden.

A3 Dichtefunktion für gekoppelte gedämpfte Zustände und Mittelwertbildung

Für die Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial g(t)}{\partial t} = \{ H_S^F, g(t) \}$$

mit H_S^F von (2.59) läßt sich für eine kanonische Verteilung die Dichtefunktion

$$g(t) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_S^F}$$

mit $\beta = 1/KT$ und $Z = \int dx_a dx_b dp_a dp_b d\vec{x} d\vec{p} e^{-\beta H_S^F}$

finden. Es gilt $g(t) = \text{const}(t)$ wegen $\partial g / \partial t = 0$, ferner für $t < t_0$:

$$g(t) = g_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta (H_{osc}^0 + H_B^0)}$$

da dann keine Wechselwirkung zwischen Bad und Oszillatoren existiert. In Gl.(2.59) ist der Term " $V_{aB} + V_{bB}$ " die Größe, die die ausgetauschte Energie zwischen Bad und Oszillatoren beschreibt. Da dieser Term nach Voraussetzung als klein gegenüber der Gesamtenergie angesehen werden kann, läßt sich in der Zustandssumme der Exponentialterm in Reihe entwickeln:

$$e^{-\beta H_S^F} = e^{-\beta H_{osc}} \cdot e^{-\beta H_B(\vec{x}, \vec{p})} \left(1 - \beta R + \frac{1}{2} \beta^2 R^2 \pm \dots \right)$$

mit $R = V_{aB} + V_{bB}$ von Gl.(2.59).

Von Gl.(2.59) erhält man nun

$$\int d\vec{x} d\vec{p} e^{-\beta H_B} g_{\gamma i}(t) = Z_B^0 \langle g_{\gamma i}^1(t) \rangle_{H_B^0} \quad \gamma = 1, \dots, 4$$

wie in II.4 beschrieben. Mit $\langle g_{\gamma i}^1(t) \rangle_{H_B^0}$ von Gl.(2.41) erhält man für $\langle R \rangle_{H_B^0}$ zusammengefaßt nach Integration über $\vec{x}$ und $\vec{p}$ (mit REDUCE):

$$\begin{aligned} \langle R \rangle_{H_B} &= \langle R \rangle_{H_B^0} = \frac{1}{2} \beta Z_B^0 \sum_{ij} \left[p_a^2 \alpha_1 \alpha_3 C_{13}^{ij} + p_b^2 \alpha_2 \alpha_4 C_{24}^{ij} \right. \\ &\quad - m^2 (\omega_a^2 x_a^2 \alpha_1 \alpha_3 C_{31}^{ij} + \omega_b^2 x_b^2 \alpha_2 \alpha_4 C_{42}^{ij}) \\ &\quad + p_a p_b (\alpha_2 \alpha_3 C_{33}^{ij} + \alpha_1 \alpha_4 C_{44}^{ij}) - m^2 x_a x_b (\alpha_2 \alpha_3 C_{32}^{ij} \omega_b^2 + \alpha_1 \alpha_4 C_{41}^{ij} \omega_a^2) \\ &\quad + m p_a x_a (\alpha_3^2 C_{33}^{ij} - \omega_a^2 \alpha_1^2 C_{11}^{ij}) + m p_a x_b (\alpha_3 \alpha_4 C_{43}^{ij} - \omega_b^2 \alpha_1 \alpha_2 C_{12}^{ij}) \\ &\quad \left. + m p_b x_a (\alpha_3 \alpha_4 C_{34}^{ij} - \omega_a^2 \alpha_1 \alpha_2 C_{21}^{ij}) + m p_b x_b (\alpha_4^2 C_{44}^{ij} - \alpha_2^2 \omega_b^2 C_{22}^{ij}) \right] \\ &\quad (+) \end{aligned}$$

Terme wie $\langle R^2 \rangle_{H_B^0}$ lassen sich vernachlässigen, da gilt [37]:

$$\langle \Delta R \rangle^2 = \langle R^2 \rangle - \langle R \rangle^2 \sim 1/I \quad (I = \text{Zahl der Badteilchen})$$

Damit folgt: $\langle R^2 \rangle = \langle R \rangle^2$

was nach Kap. I vernachlässigt werden kann.

Zur weiteren Phasenraumintegration soll $K_1=0$ in H_{osc} gesetzt werden, was ohne Einschränkung der Allgemeinheit geschehen kann, da Terme von x_a und x_b in (2.59) durch eine lineare Transformation so geschrieben werden können, daß H_{osc} in x_a und x_b quadratisch wird (ohne Mischterme). Damit wird das Integral in den Variablen p_a, p_b, x_a und x_b separierbar und kann einzeln berechnet werden. Die gemischten Terme in (+) ergeben ungerade Funktionen in den Integralen, ihr Beitrag verschwindet also. Für die geraden Terme ergibt sich mit der Beziehung

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-a^2 x^2} dx = \frac{1}{2a^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a^2 x^2}$$

der Ausdruck

$$\langle R \rangle_{H_S^F} = \frac{1}{2} m Z_B^0 \left(\sum_{ij} (\alpha_1 \alpha_3 C_{13}^{ij} + \alpha_2 \alpha_4 C_{24}^{ij}) - \sum_{ij} (\alpha_1 \alpha_3 C_{31}^{ij} + \alpha_2 \alpha_4 C_{42}^{ij}) \right)$$

Wegen der Symmetriebeziehung (2.44) für C_{13}^{ij} bzw. C_{24}^{ij} ist $\langle R \rangle_{H_S^F} = 0$.
Damit ist die Zustandssumme in erster Näherung:

$$Z = \int dx_a dx_b dp_a dp_b e^{-\beta H_{osc}} \int d\vec{x} d\vec{p} e^{-\beta H_B(\vec{x}, \vec{p})} = Z_{osc} \cdot Z_B$$

wobei $Z_B \propto Z_B^0$ ist. Mit $g(t)$ und Z lassen sich nun die Mittelwerte berechnen. Berücksichtigt man die Beziehungen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^k e^{-a^2 x^2} = \frac{k-1}{2a^2} (1 + (-1)^k) \int_0^{\infty} dx x^{k-2} e^{-a^2 x^2} \quad (k \geq 2)$$

und

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-a^2 x^2} = 0$$

läßt sich die Mittelwertbildung von Potenzen von x_a, x_b, p_a und p_b auf die Berechnung von Gaußintegralen zurückführen. Man erhält z.B.:

$$\langle p_{a/b} \rangle_{H_S^F} = 0, \quad \langle x_{a/b} \rangle_{H_S^F} = 0$$

Dasselbe Ergebnis erhält man für ungerade Potenzen von $p_{a/b}$ bzw. $x_{a/b}$.
Für gerade Potenzen erhält man z.B.:

$$\langle p_a^{2k} \rangle_{H_S^F} = \langle p_a^{2k} \rangle_{H_{osc}} (1 - k \cdot 2m\beta \sum_{ij} \alpha_1 \alpha_3 C_{13}^{ij})$$

Bis auf einen Korrekturfaktor, der sich sehr wenig von Eins unterscheidet, ist also der Mittelwert einer geraden Potenz von p_a über das Gesamtsystem gleich dem Mittelwert über das Oszillatorsystem. Entsprechend gilt dies

für die anderen kanonischen Variablen. Insbesondere erhält man für die mittlere Energie eines Oszillators:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \langle p_a^2 \rangle_{H_s^F} + \frac{1}{2} m \omega_a^2 \langle x_a^2 \rangle_{H_s^F} &= \frac{1}{2m} \langle p_a^2 \rangle_{H_{osc}} + \frac{1}{2} m \omega_a^2 \langle x_a^2 \rangle_{H_{osc}} \\ &- \beta (\langle p_a^2 \rangle_{H_{osc}} + m^2 \omega_a^2 \langle x_a^2 \rangle_{H_{osc}}) \sum_{ij} \alpha_i \alpha_j C_{ij}^{\ddot{}} \\ &= \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2\beta} = 2T \end{aligned}$$

Dies bedeutet, daß die Summe der Mittelwerte der kinetischen und der potentiellen Energie gleich kT ist (zwei Freiheitsgrade), sowohl im Oszillatorsystem als auch im Gesamtsystem.

A4 Nullstellen des charakteristischen Polynoms $P_{ab}(-i\omega)$

Für das charakteristische Polynom $P_{ab}(-i\omega)$ von Gl.(3.1c) erhält man, wenn man die Substitutionen:

$$s = i\omega$$

$$\Omega_S = \frac{1}{2} (\omega_a^2 + \omega_b^2) + K_1^2, \quad \Omega_d = \frac{1}{2} (\omega_a^2 - \omega_b^2)$$

$$\gamma_S = \frac{1}{2} (\hat{g}_a + \hat{g}_b) + \frac{1}{2} (K_{2a} + K_{2b}), \quad \gamma_d = \frac{1}{2} (\hat{g}_a - \hat{g}_b) + \frac{1}{2} (K_{2a} - K_{2b})$$

$$K_{1S}^2 = K_1^2 + \frac{1}{2} (K_a^2 + K_b^2), \quad K_{1d}^2 = \frac{1}{2} (K_a^2 - K_b^2)$$

$$K_2 = \frac{1}{2} (K_{2a} + K_{2b}), \quad K_{2d} = \frac{1}{2} (K_{2a} - K_{2b})$$

eingführt, folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} P_{ab}(-i\omega) = P_{ab}(s) = & s^4 + 4\gamma_S s^3 + 2s^2(\Omega_S + 2\gamma_S^2 - 2\gamma_d^2 + 2K_{1d}^2 - 2K_2^2) \\ & + 4s(\Omega_S\gamma_S - \Omega_d\gamma_d + K_{2d}K_{1d}^2 - K_2K_{1S}^2) \\ & - \Omega_d^2 + \Omega_S^2 - K_{1S}^4 + K_{1d}^4 \end{aligned}$$

Um die Nullstellen des Polynoms zu bestimmen, macht man den Lösungsansatz:

$$s_{1/2} = -\gamma_1 \pm i\omega_1$$

$$s_{3/4} = -\gamma_2 \pm i\omega_2$$

$$\text{mit } \omega_{1/2}^2 = \omega_{1/2}^2 - \gamma_{1/2}^2 \quad (+)$$

$$\text{und } P_{ab}(s) = (s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)(s-s_4)$$

Damit erhält man durch Koeffizientenvergleich folgende Gleichungen:

$$\omega_1^2 \omega_2^2 + K_L^4 - \Omega_S^2 + \Omega_d^2 = 0$$

$$\gamma_2 \omega_1^2 + \gamma_1 \omega_2^2 + 2\gamma_d \Omega_d - 2\gamma_S \Omega_S + 2K_M^3 = 0$$

$$\omega_1^2 + \omega_2^2 + 4\gamma_1\gamma_2 - 2\Omega_S + 4\gamma_d^2 - 4\gamma_S^2 + 4K_V^2 = 0 \quad (A4.1)$$

$$\gamma_1 + \gamma_2 - 2\gamma_S = 0$$

mit den Abkürzungen: $K_L^4 = K_{1S}^4 - K_{1d}^4$ (Maß für die Lagenkopplung)

$K_V^2 = K_2^2 - K_{2d}^2$ (Maß für die Geschw.-kopplung)

$K_M^3 = K_2K_{1S}^2 - K_{2d}K_{1d}^2$ (Mischung beider Kopplungen)

Daraus lassen sich die Lösungen berechnen. Aus den Gleichungssystemen (A4.1) erhält man die Lösungen (mit REDUCE):

$$\gamma_{1/2} = \gamma_S \pm \Gamma \quad \text{mit } |\Gamma| = \sqrt{\frac{1}{2} u + \gamma_d^2 + K_V^2}$$

$$\omega_{1/2}^2 = \Omega_S + u \pm \Delta \quad \text{mit } |\Delta| = \sqrt{u^2 + 2u\Omega_S + \Omega_d^2 + K_L^4} \quad (A4.2)$$

wobei U eine reelle Nullstelle der folgenden Gleichung ist:

$$\begin{aligned} HX = & u^3 + 2u^2 (\Omega_s - \gamma_s^2 + \gamma_d^2 + \kappa_v^2) \\ & + u (\Omega_d^2 - 4\gamma_s\gamma_d\Omega_d + 4\Omega_s(\gamma_d^2 + \kappa_v^2) - 4\gamma_s\kappa_M^3 + \kappa_L^4) \\ & + 2[(\Omega_d\kappa_v - \gamma_d\kappa_L^2)^2 + (\Omega_d\gamma_d + \kappa_v\kappa_L^2)^2 - (\Omega_d\gamma_d + \kappa_M^3)^2] \end{aligned} \quad (A4.3)$$

Mit dem Ansatz (+) ist es gelungen, das Problem auf die Lösung einer Gleichung dritten Grades zu reduzieren. Die exakte Lösung in analytischer Form kann angegeben werden (Dazu REDUCE-Programme). Für den praktischen Gebrauch ist es allerdings unzumutbar, diese Formel zu benutzen, es empfiehlt sich die Benutzung von Näherungslösungen. Nimmt man ferner an, daß die Kopplungskonstanten K_L , K_V und K_M nur schwach von den Eigenfrequenzen der ungestörten Schwingungen abhängen (wenn z.B. die Abhängigkeit in der Größenordnung liegt, wie sie in Bild 5 gegeben ist), ist

$$\frac{\kappa_v\kappa_L^2 - \kappa_M^3}{\Omega_s^{3/2}} \ll 1 \quad \text{und ebenso} \quad \frac{\kappa_v^2\kappa_L^2 - \kappa_M^6}{\Omega_s^3} \ll 1 \quad (A4.4)$$

Für Ω_s gilt dann:

$$\Omega_s = \frac{1}{2}(\omega_a^2 + \omega_b^2) + \kappa_1^2 \approx \frac{1}{2}(\omega_a^2 + \omega_b^2) + \kappa_L^2$$

Führt man die dimensionslose Größe u mit

$$U = (\Omega_s + \gamma_s^2)u$$

ein und dividiert (A4.3) durch $(\Omega_s + \gamma_s^2)^3$, erhält man:

$$HXS = u^3 + a u^2 + b u + c = 0$$

mit den dimensionslosen Koeffizienten:

$$\begin{aligned} a = & 2 \left(1 + \frac{\gamma_d^2 + \kappa_v^2 - 2\gamma_s^2}{\Omega_s + \gamma_s^2} \right) \\ b = & (\Omega_d^2 - 4\gamma_s\gamma_d\Omega_d + 4\Omega_s(\gamma_d^2 + \kappa_v^2) - 4\gamma_s\kappa_v\kappa_L^2 + \kappa_L^4) / (\Omega_s + \gamma_s^2)^2 \\ c = & 2 (\Omega_d\kappa_v - \gamma_d\kappa_L^2)^2 / (\Omega_s + \gamma_s^2)^3 \end{aligned}$$

wobei die Vernachlässigungen (A4.4) berücksichtigt wurden.

Für den Fall, daß c verschwindet, d.h.

$$\Omega_d\kappa_v - \gamma_d\kappa_L^2 = 0$$

erhält man sofort die Lösung $u=0$. Falls die anderen Lösungen u reell sind, ergeben sich nach Einsetzen und eventueller Umindizierung dieselben Lösungen $\gamma_{1/2}$ bzw. $\omega_{1/2}^2$. Man kann sich daher auf die Lösung beschränken,

die für K_L und $K_V \rightarrow 0$ die bekannten Lösungen für entkoppelte gedämpfte Schwingungen ergeben, d.h. $u(K_L=0, K_V=0)=0$. Trägt man nun a , b , und c gegen $\omega_s = (\omega_a + \omega_b)/2$ auf, kann man bei festem γ_b , was willkürlich als $\gamma_b = 60 \text{ sec}^{-1}$ gewählt wurde, durch Variation von γ_a , K_L , K_V und $\delta = (\omega_a - \omega_b)/(\omega_a + \omega_b)$ sämtliche Verhältnisse γ_s/ω_s , γ_a/ω_s , K_L/ω_s und K_V/ω_s durchlaufen und so einen Überblick über die Größenordnungen von a , b , c gewinnen. Einige Beispiele sind in den oberen Bildern A4.1 - A4.4 dargestellt. Es zeigt sich, daß c nur in wenigen Fällen merklich von Null verschieden ist, ein Maximum bei

$$\omega_{sm}^2 = 2(\gamma_s^2 + K_L^2) + \frac{3\gamma_a}{\delta \cdot K_V} K_L^2$$

hat und für $\omega_s \rightarrow \infty$ verschwindet. Ein Anwachsen von K_V erhöht den Wert von c an der Stelle des Maximums, ein Anwachsen von K_L erniedrigt ihn. Ferner läßt sich erkennen, daß $b \geq c \geq 0$ und $a(\omega_s \rightarrow \infty) = 2$ ist. Dies legt nahe, die Größe $u_0 = -c/b$ als Startpunkt eines zur Lösung von (A4.3) entwickelten Approximationsschemas benutzen, das eine Anwendung des Newton'schen Näherungsverfahrens kombiniert mit einem Iterationsverfahren ist, das auf dem Banach'schen Fixpunktsatz beruht. Damit erreicht man gewöhnlich eine rasche Konvergenz in diesem Schema, so daß nach meistens nach etwa vier Schritten einen absoluten Fehler $|u - u_n| < 10^{-10}$ erhält. Werte von u zu den dazugehörenden a , b , und c sind in den unteren Bildern A4.1 - A4.4 dargestellt. Vergleicht man die Lösung $u(\omega_s)$ mit $u_0(\omega_s) = -c/b$, sieht man, daß vor allem für $\omega_s \gg \sqrt{\gamma_s^2 + \gamma_a^2 + K_V^2}$ u und u_0 praktisch identisch sind. Um also analytische Eigenschaften von u zu untersuchen, genügt es, die nullte Näherung $u_0 = -c/b$ zu betrachten. Den quantitativen Wert von u erhält man dann leicht durch das oben erwähnte Iterationsverfahren.

Für $U = (\Omega_s + \gamma_s^2)u$ gilt dann:

$$-(\gamma_a^2 + K_V^2) \leq U/2 \leq 0$$

und

$$-(\Omega_s^2 + K_L^2) \leq U^2 + 2U\Omega_s \leq 0$$

so daß die Wurzeln Γ und Δ in (A4.2) reell sind, und die Aufspaltung von $s_1, \dots, s_4$ gerechtfertigt ist. Zwischen Γ und Δ besteht wegen $HX=0$ (A4.3) der Zusammenhang:

$$\Gamma \cdot \Delta = \gamma_s K_L + K_V K_L^2 + \Omega_s \gamma_a \quad (\text{A4.5})$$

Damit lassen sich nun in Abschnitt III.1 die geänderten Eigenfrequenzen $\omega_{1,2}$ und die Dämpfungskonstanten $\gamma_{1,2}$ sowie die geänderten Absorptionsprofile berechnen. Das Vorzeichen von Γ in (A4.2) wird dadurch bestimmt,

daß für verschwindende Kopplungen gelten muß:

$$\gamma_{112} \rightarrow \gamma_{a1b} \quad (K_L, K_V \rightarrow 0)$$

Damit ist

$$\Gamma = \operatorname{sgn} \gamma_d \cdot \sqrt{\frac{1}{2} U + \gamma_d^2 + K_V^2}$$

Aus (A4.5) folgt das Vorzeichen für Δ :

$$\operatorname{sgn} \Delta = \operatorname{sgn} \gamma_d \cdot \operatorname{sgn} (\gamma_s U + K_L^2 K_V + \Omega_d \gamma_d)$$

Da U und K negativ sind, tritt ein Vorzeichenwechsel von auf, wenn

$$\Omega_d \gamma_d > 0 \quad \text{und} \quad \Omega_d \gamma_d < -\gamma_s U - K_L^2 K_V$$

während für $K_L, K_V, U \rightarrow 0$

$$\operatorname{sgn} \Delta = \operatorname{sgn} \Omega_d \quad \text{und} \quad \omega_{112} = \omega_{a1b}$$

Insgesamt erhält man:

$$\gamma_{112} = \gamma_s \pm \Gamma \quad \Gamma = \operatorname{sgn} \gamma_d \cdot \sqrt{\frac{1}{2} U + \gamma_d^2 + K_V^2}$$

$$\omega_{112}^2 = \Omega_s + U \pm \Delta \quad \Delta = \operatorname{sgn} \Delta \cdot \sqrt{U^2 + 2U\Omega_s + \Omega_d^2 + K_L^4} \quad (\text{A4.6})$$

$$\operatorname{sgn} \Delta = \operatorname{sgn} \gamma_d \cdot \operatorname{sgn} (\gamma_s U + K_L^2 K_V + \Omega_d \gamma_d)$$



Bild A4.1 : Koeffizienten a, b, c
und u (unteres Bild)
 $K_L=100, K_V=-20, \gamma_a=70 \text{ sec}^{-1}, \delta=-0.1$

Bild A4.2 : Koeffizienten a, b, c
und u (unteres Bild)
 $K_L=0, K_V=-40, \gamma_a=60 \text{ sec}^{-1}, \delta=0.2$

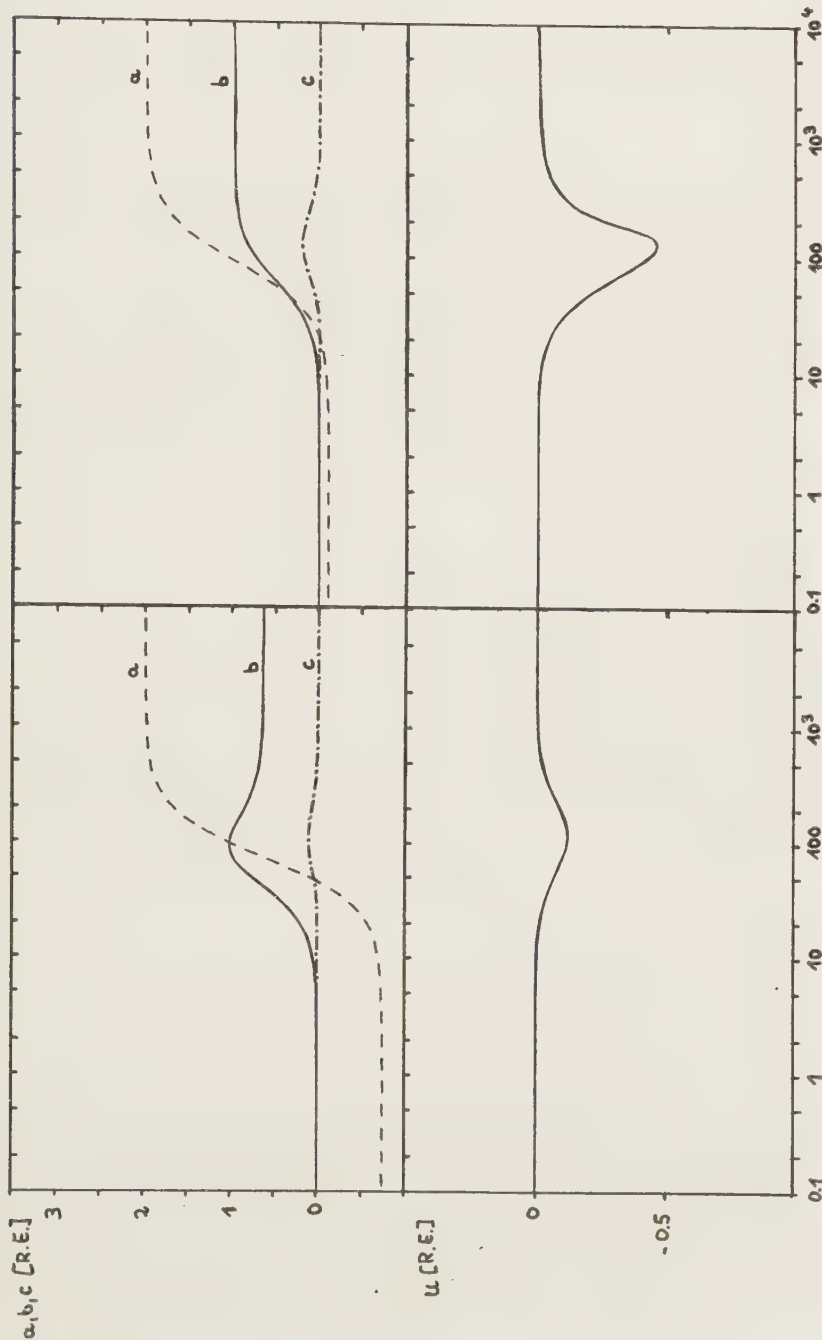


Bild A4.4 : Koeffizienten a , b , c
und u (unteres Bild)
 $K_L=5$, $K_V=100$, $\gamma_a=180 \text{ sec}^{-1}$, $\delta=-1$

Bild A4.3 : Koeffizienten a , b , c
und u (unteres Bild)
 $K_L=0$, $K_V=60$, $\gamma_a=100 \text{ sec}^{-1}$, $\delta=0.5$

A5 Energieintegral, Energiebilanz für Anregung mit einer periodischen Kraft und Nyquist-Theorem

Multipliziert man die Bewegungsgleichungen (2.61) für zwei angeregte Oszillatoren mit $m\dot{x}_a(t)$ (Gl.(2.61a)) bzw. mit $m\dot{x}_b(t)$ (Gl.(2.61b)) und integriert über ein Zeitintervall von t_1 bis t , erhält man mit $K_{1a} \approx K_{1b} = K_L$, $K_{2a} \approx K_{2b} = K_V$, $\hat{f}_a = \hat{f}_a - K_V$ und $\hat{f}_b = \hat{f}_b - K_V$ folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} m (\dot{x}_a^2(t) + \dot{x}_b^2(t) + \omega_a^2 x_a^2(t) + \omega_b^2 x_b^2(t) + K_L^2 (x_a(t) - x_b(t))^2) \\ &= \frac{1}{2} m (\dot{x}_a^2(t_1) + \dot{x}_b^2(t_1) + \omega_a^2 x_a^2(t_1) + \omega_b^2 x_b^2(t_1) + K_L^2 (x_a(t_1) - x_b(t_1))^2) \\ & - 2 \hat{f}_a m \int_{t_1}^t dt' \dot{x}_a^2(t') - 2 \hat{f}_b m \int_{t_1}^t dt' \dot{x}_b^2(t') + 4 m K_V \int_{t_1}^t dt' \dot{x}_a(t') \dot{x}_b(t') \\ & + \int_{t_1}^t dt' F(t') (\dot{x}_a(t') + \dot{x}_b(t')) \\ & + m \int_{t_1}^t dt' (f_1(t') \dot{x}_a(t') + f_2(t') \dot{x}_b(t')) \end{aligned} \quad (A5.1)$$

Bildet man nun die Phasenraummittelwerte in (A5.1), muß man berücksichtigen, daß die Lösungen $x_{a/b}(t)$ einen Anteil haben, der von den stochastischen Kräften $mf_1(t)$ und $mf_2(t)$ (siehe Gl.(2.24)) herrührt, und dessen Mittelwert zwar verschwindet, bei Mittelung über quadratische Terme jedoch einen endlichen Beitrag ergibt. Wie man aus den Bewegungsgleichungen (2.61) berechnen kann, ergeben sich folgende Lösungen des inhomogenen Systems:

$$x_{a/b}(t) = x_{a/b}^{ex}(t) + x_{a/b}^r(t) \quad (A5.2)$$

mit dem Anteil der äußeren Kraft:

$$\begin{aligned} x_a^{ex}(t) &= \int \frac{d\omega}{2\pi} (\chi_{aa}(\omega) + s \chi_{ab}(\omega)) F(\omega) e^{-i\omega t} \\ x_b^{ex}(t) &= \int \frac{d\omega}{2\pi} (s \chi_{bb}(\omega) + \chi_{ab}(\omega)) F(\omega) e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

und dem Rauschanteil (der stochastischen Kräfte):

$$\begin{aligned} x_a^r(t) &= m \int \frac{d\omega}{2\pi} (\chi_{aa}(\omega) f_1(\omega) + \chi_{ab}(\omega) f_2(\omega)) e^{-i\omega t} \\ x_b^r(t) &= m \int \frac{d\omega}{2\pi} (\chi_{bb}(\omega) f_2(\omega) + \chi_{ab}(\omega) f_1(\omega)) e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

Dabei sind $\chi_{aa}(\omega)$, $\chi_{bb}(\omega)$ und $\chi_{ab}(\omega)$ die bekannten Responsefunktionen

(siehe A6), und $F(\omega)$, $mf_1(\omega)$ und $mf_2(\omega)$ die Fouriertransformierten der jeweiligen Kräfte. Da $f_1(t)$ und $f_2(t)$ nur über die dynamischen Badvariablen von der Zeit abhängen, ist mit

$$\langle f_1(t) \rangle = \langle f_2(t) \rangle = 0$$

auch

$$\langle f_1(\omega) \rangle = \langle f_2(\omega) \rangle = 0,$$

so daß die Mittelwerte von Ausdrücken wie

$$\langle x^{ex} \cdot x^r \rangle \text{ und } \langle \dot{x}^{ex} \cdot \dot{x}^r \rangle \text{ usw.}$$

verschwinden. Die Mittelwertbildung über die Oszillatorvariablen wurde schon in Abschnitt II.7 und Anhang A3 ausführlich besprochen, so daß hier nicht mehr darauf eingegangen werden muß. Zur Berechnung der Mittelwerte des letzten Terms in (A5.1), der stochastischen Anregung, ist es nützlich, sich des Nyquist-Theorems zu bedienen. Aus der Definition (2.24) der stochastischen Kräfte und den Beziehungen (2.35) und (2.40):

$$\langle g_{\beta i}^0(t) g_{\beta j}^0(t') \rangle = C_{\beta \beta}^{ij} \delta(t-t')$$

erhält man folgende Ausdrücke:

$$\langle f_1(\omega) f_1(\omega') \rangle = 2\pi \delta(\omega + \omega') \sum_{ij} (\alpha_3^2 C_{33}^{ij} + \omega^2 \alpha_1^2 C_{11}^{ij})$$

$$\langle f_2(\omega) f_2(\omega') \rangle = 2\pi \delta(\omega + \omega') \sum_{ij} (\alpha_4^2 C_{44}^{ij} + \omega^2 \alpha_2^2 C_{22}^{ij}) \quad (A5.3)$$

$$\langle f_1(\omega) f_2(\omega') \rangle = \langle f_1(\omega') f_2(\omega) \rangle = 2\pi \delta(\omega + \omega') \sum_{ij} (\alpha_3 \alpha_4 C_{34}^{ij} + \omega^2 \alpha_1 \alpha_2 C_{12}^{ij})$$

Da Kombinationen $\chi(\omega) \langle f_i(\omega) f_j(\omega') \rangle$ bei ω -Integrationen nur einen Beitrag bei $\omega = \omega_a$ bzw. $\omega = \omega_b$ ergeben, läßt sich für ω_a, ω_b in Verbindung mit den Definitionen (2.45) unmittelbar schreiben:

$$\langle f_1(\omega) f_1(\omega_a) \rangle = 8\pi \chi_a \frac{\mathcal{T}}{m} \delta(\omega + \omega_a)$$

$$\langle f_2(\omega) f_2(\omega_b) \rangle = 8\pi \chi_b \frac{\mathcal{T}}{m} \delta(\omega + \omega_b) \quad (A5.4)$$

$$\langle f_1(\omega) f_2(\omega_a) \rangle = -8\pi \chi_v \frac{\mathcal{T}}{m} \delta(\omega + \omega_a)$$

Dies ist eine Form des bekannten Nyquist-Theorems [38].

Betrachtet man nun zwei leicht verstimmte Oszillatoren mit gleichen Dämpfungskonstanten (siehe IV.4), die mit einer periodischen Kraft $F(t) = m a \cos \bar{\omega} t$ angeregt werden, erhält man mit den Lösungen (4.14) für verschwindende Kopplung die Energiebilanzgleichung bei Integration über eine Periode ($t = t_0 + 2\pi/\bar{\omega}$) im eingeschwungenen Zustand:

$$E(t) = E(t_1) - \Delta E_a(t-t_1) - \Delta E_e^{ex}(t-t_1) + \Delta E_e^r(t-t_1) \quad (A5.5)$$

mit den Bestandteilen:

Energieinhalt des Oszillatorsystems (a,b) zur Zeit t_1 :

$$\begin{aligned} E(t_1) = & \frac{1}{2} m^3 a^2 [\bar{\omega}^2 (\chi_{aa}'^2(\bar{\omega}) + \chi_{aa}''^2(\bar{\omega})) + s^2 \bar{\omega}^2 (\chi_{bb}'^2(\bar{\omega}) + \chi_{bb}''^2(\bar{\omega})) \\ & + (\omega_a^2 - \bar{\omega}^2) (\chi_{aa}'(\bar{\omega}) \cos \bar{\omega} t_1 + \chi_{aa}''(\bar{\omega}) \sin \bar{\omega} t_1) \\ & + s^2 (\omega_b^2 - \bar{\omega}^2) (\chi_{bb}'(\bar{\omega}) \cos \bar{\omega} t_1 + \chi_{bb}''(\bar{\omega}) \sin \bar{\omega} t_1)] \\ & + 2kT \end{aligned} \quad (A5.6a)$$

($2kT$ ist der Rauschanteil der Energie)

Vom System abgegebene Energie:

$$\begin{aligned} \Delta E_a(t-t_1) = & 2\gamma_s m \int_{t_1}^t dt' (\langle \dot{x}_a^{ex}(t') \rangle^2 + \langle \dot{x}_a^{ex}(t') \rangle^2 + \langle \dot{x}_a^r(t') \rangle^2 + \langle \dot{x}_b^r(t') \rangle^2) \\ = & 2\gamma_s m^3 a^2 \pi \bar{\omega} [\chi_{aa}'^2(\bar{\omega}) + \chi_{aa}''^2(\bar{\omega})] \\ & + 2\gamma_s m^3 a^2 \pi \bar{\omega} s^2 [\chi_{bb}'^2(\bar{\omega}) + \chi_{bb}''^2(\bar{\omega})] + 4\gamma_s 2T \frac{2\pi}{\bar{\omega}} \end{aligned} \quad (A5.6b)$$

Dem System durch die äußere Kraft zugeführte Energie

$$\begin{aligned} \Delta E_e^{ex}(t-t_1) = & m a \int_{t_1}^t dt' \cos \bar{\omega} t' (\langle \dot{x}_a^{ex}(t') \rangle + s \langle \dot{x}_b^{ex}(t') \rangle) \\ = & m^2 a^2 \pi (\chi_{aa}''(\bar{\omega}) + s^2 \chi_{bb}''(\bar{\omega})) \end{aligned} \quad (A5.6c)$$

Dem System durch das Bad zugeführte Energie (Rauschenenergie):

$$\begin{aligned} \Delta E_e^r(t-t_1) = & -m \int_{t_1}^t dt' (\langle f_1(t') \dot{x}_a^r(t') \rangle + \langle f_2(t') \dot{x}_b^r(t') \rangle) \\ = & \frac{8\pi}{\bar{\omega}} \gamma_s 2T m \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega (\chi_{aa}''(\omega) + \chi_{bb}''(\omega)) = \frac{8\pi}{\bar{\omega}} \gamma_s 2T \end{aligned} \quad (A5.6d)$$

Berücksichtigt man, daß im kopplungsfreien Fall die Beziehung

$$\chi_{aa/bb}'^2(\omega) + \chi_{aa/bb}''^2(\omega) = \frac{1}{2\gamma_{a/b} m \omega} \chi_{aa/bb}''(\omega) \quad (A5.7)$$

gilt, erhält man für die gesamte während einer Periode zu- oder abgeführte Energie:

$$\Delta E = -\Delta E_a(t-t_1) + \Delta E_e^{ex}(t-t_1) + \Delta E_e^r(t-t_1) = 0 \quad (A5.8)$$

Das System befindet sich im Gleichgewicht. Die mittlere Leistung während einer Periode erhält man durch Multiplikation der entsprechenden Energien mit $\bar{\omega}/2\pi$. Bei Einstrahlung mit der Frequenz $\bar{\omega} = \sqrt{(\omega_a^2 + \omega_b^2)}/2 = \sqrt{\Omega_s}$ erhält

man für die Energien und Leistungen unter Vernachlässigung von Gliedern der Ordnung $\delta^2 \alpha_s / \gamma_s^2$:

Gesamtenergie (ohne Rauschanteil): $E^0(t) = \frac{1}{2} m a^2 \frac{1+s^2}{4\gamma_s^2}$

Eingangsleistung: - der äußeren Kraft: $N_e^{ex0} = \frac{1}{2} m a^2 \frac{1+s^2}{2\gamma_s}$

- der stoch. Kraft: $N_e^{r0} = 4\gamma_s kT$

Abgegebene Leistung: $N_a^0 = N_e^{r0} + N_e^{ex0}$

Koppelt man nun beide Oszillatoren, erhält man den Energieinhalt des Oszillatorsystems (a,b) entsprechend zu (A5.6a):

$$\begin{aligned} E(t) = & \frac{1}{2} m^3 a^2 \bar{\omega}^2 [(\chi'_{aa}(\bar{\omega}) + s \chi'_{ab}(\bar{\omega}))^2 + (\chi''_{aa}(\bar{\omega}) + s \chi''_{ab}(\bar{\omega}))^2 \\ & + (s \chi'_{bb}(\bar{\omega}) + \chi'_{ab}(\bar{\omega}))^2 + (s \chi''_{bb}(\bar{\omega}) + \chi''_{ab}(\bar{\omega}))^2] \\ & + \frac{1}{2} m^3 a^2 [(\omega_a^2 - \bar{\omega}^2) ((\chi'_{aa}(\bar{\omega}) + s \chi'_{ab}(\bar{\omega})) \cos \bar{\omega} t_1 \\ & + (\chi''_{aa}(\bar{\omega}) + s \chi''_{ab}(\bar{\omega})) \sin \bar{\omega} t_1)^2 \\ & + (\omega_b^2 - \bar{\omega}^2) ((s \chi'_{bb}(\bar{\omega}) + \chi'_{ab}(\bar{\omega})) \cos \bar{\omega} t_1 \\ & + (s \chi''_{bb}(\bar{\omega}) + \chi''_{ab}(\bar{\omega})) \sin \bar{\omega} t_1)^2] \quad (A5.9) \\ & + 2 \mathcal{E} T \end{aligned}$$

Für die Rauschenenergie erhält man nun:

$$\begin{aligned} \Delta E_e^r(t-t_1) = & \frac{8\pi}{\bar{\omega}} m \gamma_s \mathcal{E} T \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega (\chi''_{aa}(\omega) + \chi''_{bb}(\omega)) \\ & - \frac{16\pi}{\bar{\omega}} m k_v \mathcal{E} T \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega \chi''_{ab}(\omega) \end{aligned} \quad (A5.10)$$

Über die Zerlegung der Responsefunktionen (3.17, 3.18, 3.21) kann man leicht sehen, daß der letzte Term keinen Beitrag ergibt, und die Integration von $\omega \chi''_{aa}(\omega)$ bzw. $\omega \chi''_{bb}(\omega)$ unabhängig von den Kopplungsstärken jeweils den Beitrag $1/2m$ ergeben:

$$\Delta E_e^r(t-t_1) = \frac{8\pi}{\bar{\omega}} \gamma_s \mathcal{E} T$$

Wie zu erwarten ist, bleibt der Anteil der Rauschenenergie unabhängig von der Kopplung. Dies gilt ebenso für den Rauschanteil der vom System abgegebenen Energie:

$$\begin{aligned} \Delta E_a^r(t-t_1) = & 2m \int_{t_1}^t dt' [\gamma_s (\langle \dot{x}_a^r(t')^2 \rangle + \langle \dot{x}_b^r(t')^2 \rangle) - 2k_v \langle \dot{x}_a^r(t') \dot{x}_b^r(t') \rangle] \\ = & 8\pi \gamma_s \mathcal{E} T / \bar{\omega} \end{aligned}$$

Beschränkt man sich nun wieder auf den Fall verschwindender Lagenkopplung bei optimaler Geschwindigkeitskopplung $K_V = -\gamma_s$, erhält man für die insgesamt vom System abgeführte Energie:

$$\begin{aligned} \Delta E_a(t-t_1) &= 2 \gamma_s m \int_{t_1}^t dt' (\langle \dot{x}_a^{ex}(t') \rangle + \langle \dot{x}_b^{ex}(t') \rangle)^2 + \frac{8\pi}{\bar{\omega}} \gamma_s \mathcal{E} T \\ &= 2 \gamma_s m^3 a^2 \pi \bar{\omega} [(\chi_{aa}'(\bar{\omega}) + s \chi_{bb}'(\bar{\omega}) + (1+s) \chi_{ab}'(\bar{\omega}))^2 + (\chi_{aa}''(\bar{\omega}) + s \chi_{bb}''(\bar{\omega}) + (1+s) \chi_{ab}''(\bar{\omega}))^2] + \frac{8\pi}{\bar{\omega}} \gamma_s \mathcal{E} T \end{aligned} \quad (A5.11)$$

Wie man aus obiger Gleichung sieht, wird die Energie über den Gleichtaktanteil der Schwingungen abgeführt. Für die von der äußeren Kraft zugeführten Energie erhält man schließlich:

$$\begin{aligned} \Delta E_e^{ex}(t-t_1) &= m a \int_{t_1}^t dt' \cos \bar{\omega} t' (\langle \dot{x}_a^{ex}(t') \rangle + s \langle \dot{x}_b^{ex}(t') \rangle) \\ &= m^2 a^2 \pi [\chi_{aa}''(\bar{\omega}) + s^2 \chi_{bb}''(\bar{\omega}) + 2s \chi_{ab}''(\bar{\omega})] \end{aligned} \quad (A5.12)$$

Die entsprechenden Leistungen erhält man wieder durch Multiplikation mit $\bar{\omega}/2\pi$. Das System ist dann im Gleichgewicht, wenn die Energiebilanzgleichung (A5.8) erfüllt ist. Dies ist auf jeden Fall erfüllt, wenn man das System einfach ($s=0$), im Gleichtakt ($s=1$) oder im Gegentakt ($s=-1$) mit der Frequenz $\bar{\omega} = \sqrt{\Omega_s}$ anregt. Die Responsefunktionen sind dann an dieser Stelle (nach A6):

$$\begin{aligned} \chi_{aa}''(\sqrt{\Omega_s}) &= \chi_{bb}''(\sqrt{\Omega_s}) = -\chi_{ab}''(\sqrt{\Omega_s}) = \frac{\gamma_s}{2m\delta^2\Omega_s^{3/2}} \\ \chi_{aa}'(\sqrt{\Omega_s}) &= -\chi_{bb}'(\sqrt{\Omega_s}) = \frac{1}{2m\delta\Omega_s}, \quad \chi_{ab}'(\sqrt{\Omega_s}) = 0 \end{aligned} \quad (A5.13)$$

Für die jeweiligen Leistungen und Gesamtenergien ergibt sich dann:

$$\begin{aligned} \text{Gesamtenergie} \quad E(t) &= \frac{m a^2}{16 \gamma_s^2} ((1-s)^2 + \frac{\delta_s}{\gamma_s} (1+s^2)) \\ (\text{ohne Rauschanteil}) \end{aligned}$$

$$\text{Eingangsleistung: - der äußeren Kraft} \quad N_e^{ex} = \frac{1}{2} m a^2 \frac{(1-s)^2}{4 \gamma_s^2}$$

$$\text{- der stoch. Kraft} \quad N_e^r = N_e^{ro} = 4 \gamma_s k T$$

$$\text{Abgegebene Leistung} \quad N_a = N_e^{ex} + N_e^r$$

bei Vernachlässigung von Gliedern der Ordnung $\delta^2 \Omega_s / \gamma_s^2$.

Damit erhält man das Verhältnis der Energien:

$$\frac{E(t)}{E^0(t)} = \frac{\gamma_s^2}{\gamma_2^2} \left(\frac{\gamma_2}{2\gamma_s} + \frac{(1-s)^2}{2(1+s^2)} \right) = \begin{cases} \gamma_s / 2\gamma_2 & s = 1 \\ \gamma_s^2 / 2\gamma_2^2 & s = 0 \\ \gamma_s^2 / \gamma_2^2 & s = -1 \end{cases}$$

und der Eingangsleistungen:

$$\frac{N_e^{ex}}{N_e^{exo}} = \frac{\gamma_s}{\gamma_2} \frac{(1-s)^2}{2(1+s^2)} = \begin{cases} 0 & s = 1 \\ \gamma_s / 2\gamma_2 & s = 0 \\ \gamma_s / \gamma_2 & s = -1 \end{cases}$$

Zusätzlich läßt sich noch bemerken, daß unabhängig von der Art der äußeren Kraft die oben angegebenen Quotienten immer gültig sind, wenn man sich auf die Maxima der Leistungs- bzw. Energieprofile bezieht.

A6 Exakte Formulierung der Responsefunktionen

Von Gl.(3.6) erhält man die Responsefunktionen:

$$\chi_{aa}(\omega) = \frac{1}{m} \frac{P_a(-i\omega)}{P_{ab}(-i\omega)}, \quad \chi_{bb}(\omega) = \frac{1}{m} \frac{P_b(-i\omega)}{P_{ab}(-i\omega)}, \quad \chi_{ab}(\omega) = \frac{1}{m} \frac{k_L^2 - 2i\omega k_V}{P_{ab}(-i\omega)}$$

Mit Hilfe von (3.1c) läßt sich $P_{ab}(-i\omega)$ berechnen, und mit REDUCE kann man die Responsefunktionen in Real- und Imaginärteil zerlegen. Insgesamt erhält man für die Zähler der dispersiven Responen:

$$\begin{aligned} \chi'_{aa\bar{z}}(\omega) = & -\omega^6 - \omega^4 [4(k_V^2 + \gamma_b^2) + \Omega_d - 3\Omega_s] \\ & + \omega^2 [4k_L^2(\gamma_b - k_V)^2 + 4k_V^2\omega_b^2 + 4\gamma_b^2\omega_a^2 + k_L^4 + (\omega_a^2 + k_L^2)^2 - 4\Omega_s^2] \\ & + (\Omega_d - \Omega_s)(k_L^2 + \Omega_d^2 - \Omega_s^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi'_{bb\bar{z}}(\omega) = & -\omega^6 - \omega^4 [4(k_V^2 + \gamma_a^2) - \Omega_d - 3\Omega_s] \\ & + \omega^2 [4k_L^2(\gamma_a - k_V)^2 + 4k_V^2\omega_a^2 + 4\gamma_a^2\omega_b^2 + k_L^4 + (\omega_b^2 + k_L^2)^2 - 4\Omega_s^2] \\ & - (\Omega_d + \Omega_s)(k_L^2 + \Omega_d^2 - \Omega_s^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi'_{ab\bar{z}}(\omega) = & \omega^4(k_L^2 - 8\gamma_s k_V) + 2\omega^2 [-k_L^2(2(\gamma_a\gamma_b + k_V^2) + \Omega_s) + 4k_V(\Omega_s\gamma_s - \Omega_d\gamma_d)] \\ & + k_L^2(\Omega_s^2 - \Omega_d^2 - k_L^4) \end{aligned}$$

wobei wieder die Abkürzungen: $\Omega_s = \frac{1}{2}(\omega_a^2 + \omega_b^2) + k_L^2$, $\Omega_d = \frac{1}{2}(\omega_a^2 - \omega_b^2)$

$$\gamma_s = \frac{1}{2}(\gamma_a + \gamma_b), \quad \gamma_d = \frac{1}{2}(\gamma_a - \gamma_b)$$

benützt wurden. Mit den Abkürzungen: $\Omega_b = \omega^2 - \omega_b^2 - k_L^2$

$$\Omega_a = \omega^2 - \omega_a^2 - k_L^2$$

lassen sich die Zähler der absorptiven Responen formulieren:

$$\begin{aligned} \chi''_{aa\bar{z}}(\omega) = & 2\omega [\gamma_a\Omega_b^2 + 2\Omega_b(k_V k_L^2 + 2\gamma_b(\gamma_a\gamma_b - k_V^2)) \\ & + \gamma_b(4(\omega_b^2 + k_L^2)(\gamma_a\gamma_b - k_V^2) + k_L^4)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi''_{bb\bar{z}}(\omega) = & 2\omega [\gamma_b\Omega_a^2 + 2\Omega_a(k_V k_L^2 + 2\gamma_a(\gamma_a\gamma_b - k_V^2)) \\ & + \gamma_a(4(\omega_a^2 + k_L^2)(\gamma_a\gamma_b - k_V^2) + k_L^4)] \end{aligned}$$

$$\chi''_{abz}(\omega) = -2\omega \kappa_V \left[\frac{1}{4} (\Omega_a + \Omega_b)^2 - 4\omega^2 (\gamma_a \gamma_b - \kappa_V^2) - \Omega_d^2 + \kappa_L^4 \right] \\ - 2\omega \kappa_L^2 \left[\gamma_S (\Omega_a + \Omega_b) + 2\gamma_d \Omega_d \right]$$

Den gemeinsamen Nenner erhält man dann:

$$\chi_N(\omega) = P_{ab}(-i\omega) P_{ab}(-i\omega)^* \\ = (\Omega_a \Omega_b + 4\omega^2 (\kappa_V^2 - \gamma_a \gamma_b) - \kappa_L^4)^2 \\ + 4\omega^2 (\Omega_a \gamma_b + \Omega_b \gamma_a - 2\kappa_V \kappa_L^2)^2$$

Damit lassen sich nun die Responsefunktionen bilden. Durch Partialbruchzerlegung erhält man die Aufspaltung in die Moden 1 und 2.

L i t e r a t u r:

- [1] H. Dekker : Classical and Quantum Mechanics of the Damped
Harmonic Oscillator
Phys. Rep. 80, no.1, 1-112 (1981)
- [2] Landau/Lifschitz : Mechanik (Berlin, 1963)
- [3] H. Goldstein : Classical Mechanics
(Addison-Wesley, Reading, 1953)
- [4] R.W. Hasse : Rep. Prog. Phys., vol 41, 1027 (1978)
- [5] J. Messer : Acta Phys. Austr. 50, 75 (1979)
- [6] K. Albrecht : Phys. Lett. vol 56B, no2, 127 (1975)
- [7] R.W. Hasse : J.Math.Phys. vol 16, no.10, 2005 (1975)
- [8] W.Stocker,K.Albrecht: Ann. of Phys. 117, 436 (1979)
- [9] R.W. Hasse : Phys. Lett. vol 85B, no.2,3 , 197 (1979)
- [10] H. Bateman : Phys. Rev. vol 38, 815 (1931)
- [11] F. Bopp : Bayr. Akad. Wiss.,Math.-Naturw. Klasse,
Sitzungsbericht 67 (1973)
- [12] Feshbach&Tikochinsky: Transactions of N.Y.Ac. of Sc. (1978)
- [13] Morse & Feshbach : Meth. of Theor. Phys.I (1953)
- [14] J. Burzlaff : Dissertation (1977)
- [15] G.Gosh,R.W.Hasse : Phys. Rev.A vol 24, no.3, 1621 (1981)
- [16] P. Caldirola : Nuovo Cimento 18, 393 (1941)
- [17] E. Kanai : Progr. Theor. Phys.3, 440 (1948)
- [18] I.R. Senitzky : Phys. Rev. vol 111, no.1, 3 (1958)
Phys. Rev. vol 115, no.2, 227 (1959)
- [19] I.R. Senitzky : Phys. Rev. vol 119, , 670 (1960)
Phys. Rev. vol 124, no.3, 642 (1961)
- [20] L.Y.Bahar&H.G.Kwatny: Am. J. of Phys. 49(11), 1062 (1981)
- [21] W. Sarlet : J. Phys.A: Math. Gen.14, 2227 (1981)
- [22] R.K. Colegrave : J. Phys.A: Math. Gen.14, 2269 (1981)
& M.S. Abdalla
- [23] S. Okubo : Phys. Rev. vol 23, no.6, 2776 (1981)
- [24] N.A. Lemos : Am. J. Phys. 49(12), 1181 (1981)
Phys. Rev.D vol 24, no.4, 1036 (1981)
- [25] D.M. Greenberger : J. Math. Phys. 20, 762 (1979)
J. Math. Phys. 20, 771 (1979)
- [26] J.R. Ray : Am. J. Phys. 47(7), 626 (1979)
- [27] E.G.Weidemann&A.Hayd: J. Chem. Phys. vol 67, no.8, 3713 (1977)

- [28] J.C. Evans : Spectrochimica Acta vol 18, 507 (1962)
- [29] DeGroot & Mazur : Grundlagen der Thermodynamik irreversibler
Prozesse (BI 162/162a, 1969)
- [30] G.W.Ford, M.Kac & : J. Math. Phys. vol 6, no.4, 504 (1965)
& P.Mazur
- [31] D.J. Diestler : Mol. Phys. vol 32, no.4, 1091 (1976)
- [32] M. Berkowitz & : J. Chem. Phys. 75(2), 957 (1981)
J.A.McGammon
- [33] U.Mohanty,K.E.Shuler: Physica 115A, 1 (1982)
& I.Oppenheim
- [34] J.L.McHale&C.H.Wang : J. Chem. Phys. 73(6), 3600 (1980)
- [35] K.Fujita & M.Kimura : Mol. Phys. vol 41, no.5, 1203 (1980)
- [36] M.C.Wang & : Rev. Mod.Phys. vol 17, no.1/2, 323 (1945)
G.E.Uhlenbeck
- [37] Landau/Lifschitz : Statistische Physik (Berlin, 1979)
- [38] R. Kubo : Rep. Prog. Phys. vol 29, 225 (1966)
- [39] P.C. Martin in: The Many Body Problem (Ed. deWitt) (1958)
- [40] D. Forster : Hydrodynamics, Fluctuations, Broken
Symmetry and Correlation Funktionen (1975)
- [41] A.C. Hearn : REDUCE II User's Manual (Uni.of Utah, 1973)
- [42] H. Haken : Synergetics (Springer Tracts of Modern
Physics, 1977)
- [43] A.Hayd M.A.N./NT : Persönliche Mitteilung
- [44] A.L.Schawlow & : Phys. Rev. vol 112, no.6, 1940 (1958)
C.H.Townes
J.P.Gordon, : Phys. Rev. vol 99, no.4, 1264 (1955)
H.J.Zeiger,C.H.Townes
- [45] A.S. Davydov : Quantum Mechanics (Ed.ter Haar,Pergamon 1965)
- [46] A. Hayd : Dissertation (1975)
- [47] E.Mollwo,W.Kaule : Maser und Laser (BI 79/79a, 1966)
- [48] H. Haken : Laser Theory,Enc.of Phys.XXV/2c(Springer1970)
H.Haken,H.C.Wolf : Atom- und Quantenphysik (Springer, 1983)
- [49] A. Yariv : Quantum Electronics (Wiley 1975)
- [50] R. Graham in: Quantum States in Optics and Solid States
Physics (Springer Tracts of Mod. Phys.,1973)
- [51] S.A. Losev : Gasdynamic Laser, Chem. Phys. 12, 222
(Springer 1981)
- [52] G. Bekefi (Ed.) : Principles of Laser Plasmas (London 1976)

Herrn Professor Dr. E. Weidemann danke ich für die Anregung und Betreuung dieser Arbeit.

Herrn Dr. A. Hayd von der Neuen Technologie der M.A.N.-AG sei für viele nützliche Diskussionen gedankt.

Der bayerischen Akademie der Wissenschaften danke ich für die Benutzungserlaubnis für die Betriebsmittel des Leibniz-Rechenzentrums.

Lebenslauf

Name: Albrecht Martin Maurer
Geburtsdatum und -ort: 2. 12. 1945 , Berlin
Staatsangehörigkeit: Deutsch
Familienstand: ledig
Eltern: Hermann Maurer, städt. Angestellter
und Frau Johanna, geb. Schanzenbach

1952-1956 Besuch der Volksschule in Heilbronn
1956-1965 Besuch des Theodor-Heuß-Gymnasiums in Heilbronn
1965-1967 Wehrdienst
SS 1967 - SS 1969 Studium der Physik an der TU Stuttgart mit
Abschluß Vordiplom
WS 1969 - WS 1974 Studium der Physik an der LMU München mit
Abschluß Diplom
Diplomarbeit bei Prof. Dr. Weidemann am Lehrstuhl
Prof. Bopp mit dem Thema:
Regge-Schnitte: Einführung in die Theorie der
Regge-Schnitte und ihre Anwendung
auf Pion-Nukleon-Streuung
Juni 1975 Beginn der Dissertation bei Prof. Dr. Weidemann
April 1978 - EDV-Kurs bei der Siemens AG im Rahmen einer
Nov. 1978 Fortbildungsmaßnahme der ZAV
Januar 1979 Wiederaufnahme der Arbeit an der Dissertation zum
vorliegenden Thema
Dez. 1983 Abschluß der Dissertation
1980 - 1983 Tätigkeit als freier Mitarbeiter der
M.A.N.-AG/Neue Technologie:
Mitarbeit bei Berechnungen zu Problemen der
Festkörperphysik, Hydrodynamik und
Magneto-Plasma-Dynamik

